

THESES

présentées
à la Faculté des Sciences de l'Université de Nancy
pour obtenir
le grade de Docteur-Ingénieur

par

Louis VINCENT
Ingénieur I.S.I.N.

Première Thèse

**OPTIMISATION ET CONTROLE D'UN REACTEUR ADIABATIQUE
A LITS MULTIPLES**

Deuxième Thèse

**CARACTERISTIQUES ACTUELLES ET EVOLUTION PROBABLE
DES MEMOIRES D'ORDINATEUR**

SOUTENUES LE JANVIER 1971, DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY

MM.	LE GOFF	Président
	VILLERMAUX	Examineurs
	MALENGÉ	
	BADGUERAHANIAN	Invités
	MEZENECV	



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41551928_0015

THESES

présentées
à la Faculté des Sciences de l'Université de Nancy
pour obtenir
le grade de **Docteur-Ingénieur**

par

Louis VINCENT

Ingénieur I.S.I.N.

Première Thèse

**OPTIMISATION ET CONTROLE D'UN REACTEUR ADIABATIQUE
A LITS MULTIPLES**

Deuxième Thèse

**CARACTERISTIQUES ACTUELLES ET EVOLUTION PROBABLE
DES MEMOIRES D'ORDINATEUR**

SOUTENUES LE JANVIER 1971, DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY

MM.	LE GOFF	Président
	VILLERMAUX MALENGÉ	Examineurs
	BADGUERAHANIAN MEZENCEV	Invités



ANNEE SCOLAIRE 1970/71

DOYEN : M. AUBRY
 ASSESSEUR : M. GAY

Doyens honoraires : MM. CORNUBERT - ROUBAULT -

Professeurs honoraires : MM. RAYBAUD - LAFFITTE - LERAY - JOLY - LAPORTE - EICHORN -
 CAPELLE - GODEMENT - DUBREIL - L. SCHWARTZ - DIEUDONNE - LETORT - DODE - GAUTHIER -
 COUDET - OLMER - CORNUBERT - CHAPELLE - GUERIN - WAHL -

Maîtres de Conférences honoraires : M. LIENHART - PIERRET -

PROFESSEURS

MM.			
ROUBAULT	Géologie	HADNI	Physique
VEILLET	Biologie Animale	*BASTICK	Chimie
BARRIOL	Chimie Théorique	DUCHAUFOUT	Pédologie
BIZETTE	Physique	GARNIER	Agronomie
GUILLIEN	Electronique	NEEL	Chimie Organique Industrielle
LEGRAS	Mécanique Rationnelle	BERNARD	Géologie Appliquée
BOLFA	Minéralogie	*CHAMPIER	Physique
NICLAUSE	Chimie	*GAY	Chimie Biologique
FAIVRE	Physique Appliquée	STEPHAN	Zoologie
AUBRY	Chimie Minérale	*CONDE	Zoologie
COPPENS	Radiogéologie	*WERNER	Botanique
DUVAL	Chimie	EYMARD	Calcul Différentiel et Intégral
FRUHLING	Physique	FELDEN	Physique
HILLY	Géologie	*GOSSE	Mécanique Physique
LE GOFF	Génie Chimique	*DAVOINE	Physique (ENSMIM)
SUINER	Physique Expérimentale	HORN	Physique (1 ^{er} cycle)
CHAPON	Chimie Biologique	*ROCCI	Géologie
HEROLD	Chimie Minérale Ind.	*Me LUMER	Mathématiques
SCHWARTZ B.	Exploitation Minière	DELPUECH	Chimie Physique
*MALAPRADE	Chimie	Mlle HUET	Analyse Supérieure
MANGENOT	Botanique	BLAZY	Minéralogie Appliquée
GAYET	Physiologie	CAUBERE	Chimie Organique
		VUILLAUME	Psychophysiologie
		ALAIS	Chimie Biologique

N... Mécanique Appliquée

N... Méthodes Mathématiques de la Physique

N... Mécanique Rationnelle

(*) Professeur titulaire à titre personnel

PROFESSEURS SANS CHAIRE

Mme BASTICK	Chimie P.C. EPINAL	JANOT	Physique P.C. EPINAL
MM. GUDÉFIN	Physique	CACHAN	Entomologie Appliquée (ENSA)
FRENTZ	Biologie Animale	JACQUIN	Pédologie et Chimie agri.
MARI	Chimie (ISIN)	MAINARD	Physique M.P.
DEVIOT	Physique du Solide	MARTIN	Chimie P.C.
FLECHON	Physique P.C.	PAULMIER	Mécanique Expérimentale
VIGNES	Métallurgie	PROTAS	Minéralogie
JURAIN	Géologie C.B.G.	RIVAIL	Chimie Appliquée (CUCES)
BALESDENT	Thermodynamique, Chimie Appliquée (ENSIC)	DEPAIX	Probabilités et Statistiques

MAITRES DE CONFERENCES

MM. VILLERMAUX	Génie Chimique	CASTRO	Chimie Organique
METCHE	Biochimie Appliquée (Brasserie)	DEKHEIMER	Botanique
BAUMANN	Physique 1 ^{er} cycle	NOVÉRAZ	Mathématiques
DURAND	Physique	TOURET	Géologie
GRANCE	Physique (ISIN)	MALENCE	Chimie (ENSIC)
BAVEREZ	Chimie (ENSIC)	GROSS	Chimie Organique
CHAMBON	Exploitation Minière (MINES)	LOCHON	Chimie Organique
HUSSON	Physique (ENSEM)	N...	Maths Appliquées
WEISSLINGER	Physique	N...	Mathématiques
GERL	Physique (MINES)	N...	Mathématiques
ROQUES	Chimie Minérale	N...	Mathématiques
FERRIER	Mathématiques	N...	Physiologie Animale
GILORMINI	Mécanique flui. (ISIN)	N...	Laiterie (Ecole Laiterie)
HILY	Mathématiques P.C.	N...	Maths Appliquées
		N...	Pétrographie
		N...	Mathématiques
		N...	Physique (Aérotherm.)
		N...	ISIN

CHARGES D'ENSEIGNEMENT

MM. AMARIGLIO - COEURE - DAVRAINVILLE - GIRARDEAU - OVAERT - RUYER - WEBER - PUJOL - SCHREIBER - GEORGES - MARTIN - WEISBROD -

A ma femme

A ma famille

A mon Maître

Monsieur le Professeur J.P. MALENCE¹

AVANT - PROPOS

Nos remerciements s'adressent tout particulièrement à Monsieur le Professeur MALENCE sous la direction et avec l'active collaboration duquel ont été effectués ces travaux .

Nous le remercions de nous avoir formé à l'esprit et aux techniques de recherche scientifique au cours de trois années passées au Service de Calcul commun au Centre de Cinétique Physique et Chimique du C.N.R.S. et de l'Ecole Nationale Supérieure des Industries Chimiques .

Nous avons trouvé en lui un guide peut-être exigeant mais toujours amical . Nous avons pu apprécier sa haute compétence au cours de discussions parfois mouvementées mais souvent très fructueuses .

Nous exprimons notre gratitude à Monsieur le Professeur LE GOFF, Professeur de Génie Chimique à l'E.N.S.I.C. et Directeur du Centre de Cinétique Physique et Chimique du C.N.R.S. d'avoir bien voulu accepter la présidence de notre jury .

Nous remercions Monsieur le Professeur VILLERMAUX, Monsieur le Professeur MEZENCEV et Monsieur BADGUERAHANIAN, membre du Comité Scientifique de la Délégation Générale à la Recherche Scientifique et Technique, d'avoir accepté de faire partie de notre jury .

Nos remerciements vont également à tous nos camarades, chercheurs, techniciens et administratifs du service de calcul et particulièrement à Monsieur P. SUTRE qui a bien voulu accepter de relire ce mémoire .

PLAN

Introduction

1er chapitre - Exposé du problème . Bibliographie

2e chapitre - Etude au stade projet

- Réacteur à refroidissement par injection de réactif frais
 - . sans contrainte de température
 - . avec contraintes de température
- Réacteur à refroidissement par échangeurs

3e chapitre - Etude au stade exploitation

- Méthode
- Résultats
 - . vieillissement du catalyseur
 - . variation de la composition du mélange à l'entrée du réacteur
 - . variation du débit
- Fluctuations de la température d'entrée

Conclusion

INTRODUCTION

Ce travail a pour but l'étude de l'optimisation des réacteurs adiabatiques catalytiques à plusieurs lits avec refroidissement intermédiaire . Ce type de réacteur est utilisé pour la fabrication de produits chimiques par réactions exothermiques équilibrées . La recherche de taux de conversion élevés ainsi que les limites de température d'utilisation des catalyseurs imposent le fractionnement du réacteur en plusieurs lits et le refroidissement du mélange entre les lits . Les deux modes de refroidissement les plus utilisés sont les échangeurs de chaleur et l'injection de réactif frais .

L'importance de l'optimisation de ce type de réacteur est due à leur utilisation pour la fabrication, entre autre produits, de l'acide sulfurique (production française en 1968 environ 3,5 millions de tonnes) et de l'ammoniac par le procédé Haber (production française en 1968 environ 1,7 million de tonnes) . Pour donner une idée des dimensions des réacteurs actuellement réalisés, signalons que leur capacité de production varie de 50 à 1000 tonnes par jour .

La complexité de l'optimisation de ces réacteurs est due au grand nombre de variables qui interviennent dans l'expression de la fonction objectif . Plusieurs solutions ont été proposées ; aucune ne donne entièrement satisfaction . Soit que le temps de calcul se révèle trop important, soit même que des erreurs de principe aient été commises.

Nous analysons les principaux résultats obtenus du point de vue de la précision et du point de vue du temps de calcul .

Nous exposons ensuite une méthode d'optimisation originale permettant de déterminer les valeurs des variables de décision au stade du projet .

Nous présentons ensuite une méthode permettant l'optimisation, au cours de son exploitation, d'un réacteur soumis aux perturbations que l'on peut rencontrer dans la pratique industrielle .

CHAPITRE I

EXPOSE DU PROBLEME - BIBLIOGRAPHIE

- I.1 - Les réacteurs adiabatiques à plusieurs lits avec refroidissement intermédiaire
 - I.1.1 - Généralités
 - I.1.2 - Exemple d'utilisation
- I.2 - La mise en équation du problème
 - I.2.1 - Les cinétiques de l'oxydation de l'anhydride sulfureux
 - I.2.2 - Mise en équation
 - I.2.2.1 - Equations de fonctionnement d'un lit
 - I.2.2.2 - Fonction objectif dans le cas du refroidissement par injection de réactifs frais
 - I.2.2.3 - Fonction objectif dans le cas du refroidissement par échangeurs
 - I.2.2.4 - Difficultés du problème
- I.3 - Bibliographie
 - I.3.1 - Ouvrages généraux
 - I.3.2 - Ouvrages se rapportant au problème du refroidissement par échangeurs
 - I.3.3 - Ouvrages se rapportant au problème du refroidissement par injection de réactifs frais

CHAPITRE I

Exposé du problème - Bibliographie

Dans ce chapitre, nous décrivons tout d'abord les réacteurs que nous nous proposons d'optimiser . Nous choisissons un modèle mathématique pour représenter leur fonctionnement, après avoir évoqué l'importance du choix d'une "cinétique" . Nous analysons ensuite brièvement les solutions qui ont déjà été proposées par d'autres auteurs .

EXPOSE DU PROBLEME - BIBLIOGRAPHIE

1.1 Les réacteurs adiabatiques à plusieurs lits avec refroidissement intermédiaire

1.1.1 - Généralités

Nous nous proposons de réaliser une réaction exothermique équilibrée du type :



pour fabriquer le produit C. Nous savons que dans ce cas, il existe une température T^* de fonctionnement optimum du réacteur. Cette température dépend de la composition du mélange à l'instant considéré. Si la température T du mélange est supérieure à T^* l'équilibre est déplacé vers la gauche, ce qui est contraire au but fixé. Si T est inférieur à T^* , la vitesse de réaction est trop faible. Donc pour optimiser la conversion finale, il faut régler T de telle façon que la vitesse soit constamment maximale. En pratique, il est très difficile de suivre cette progression optimale de température (P.O.T). On préfère associer plusieurs réacteurs adiabatiques fonctionnant autour de cette progression optimale en refroidissant le mélange entre les lits soit par injection de réactifs frais (fig. 1.1.1) soit en utilisant des échangeurs (fig. 1.1.2).

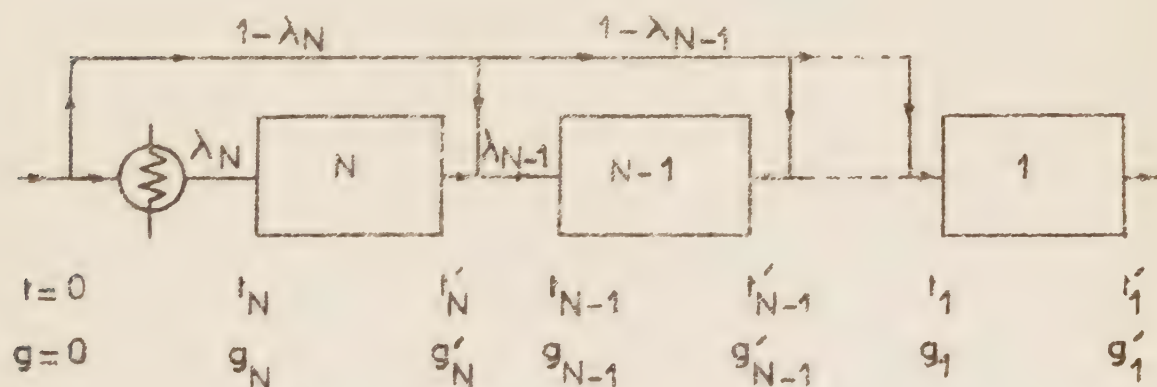
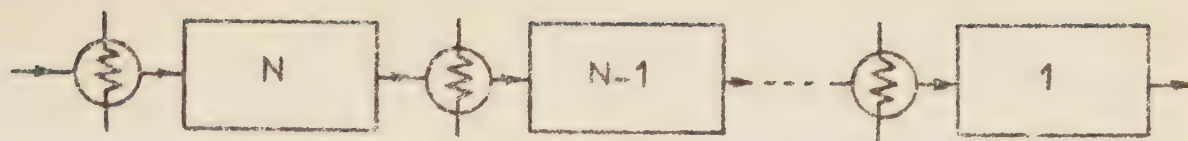


Fig. 1.1.1 - Refroidissement par injection de réactif frais



$$\begin{array}{ccccccc}
 l=0 & l_N & l'_N & l_{N-1} & l'_{N-1} & l_1 & l'_1 \\
 g=0 & g_N=0 & g_N & g_{N-1} & g'_{N-1} & g_1 & g'_1
 \end{array}$$

Fig. I.1.2 - Refroidissement par échangeurs

A l'intérieur d'un lit, le mélange évolue sans échange de chaleur avec l'extérieur. Nous montrons dans un paragraphe ultérieur que dans ce cas le bilan thermique conduit à une équation de la forme :

$$g - g_i = a(T - T_i)$$

où g et T sont la conversion et la température en un point quelconque du lit
 g_i et T_i sont la conversion et la température à l'entrée du lit i .

Ces grandeurs sont exprimées dans des unités que nous précisons plus loin. On admet en général que a , qui dépend en fait de la variation d'enthalpie du mélange, varie peu en fonction de T dans le domaine de température où s'effectue la réaction. L'évolution du mélange à l'intérieur d'un lit est donc représentée dans le plan (T, g) par une droite de pente $1/a$ (figures I.1.3 et I.1.4). Le refroidissement par échangeurs est représenté par une droite parallèle à l'axe des T (figure I.1.4).

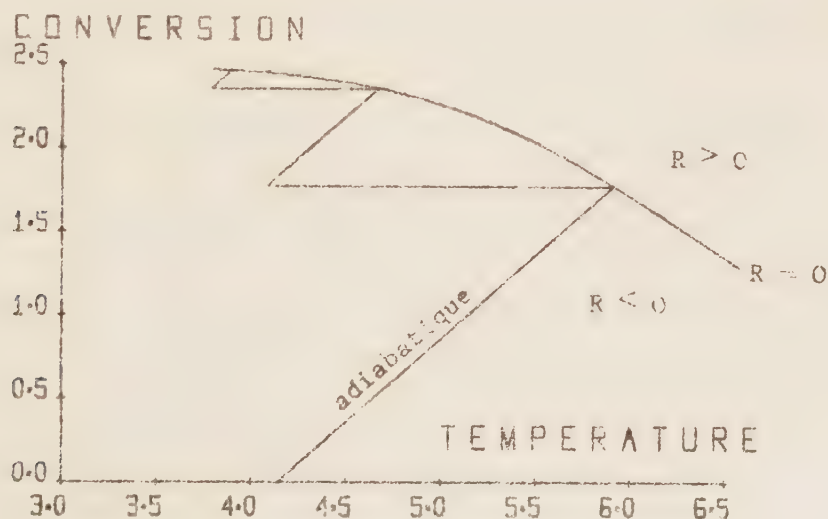


Fig. I.1.4 - Refroidissement par échangeurs

Si nous notons g'_i et T'_i la conversion et la température à la sortie du lit i , le refroidissement par injection de réactifs frais est représenté par une droite passant par g'_i et T'_i et par le point $g = 0$ et $T = 0$ si nous supposons que la température et la conversion du réactif frais sont nulles (figure I.1.3) .

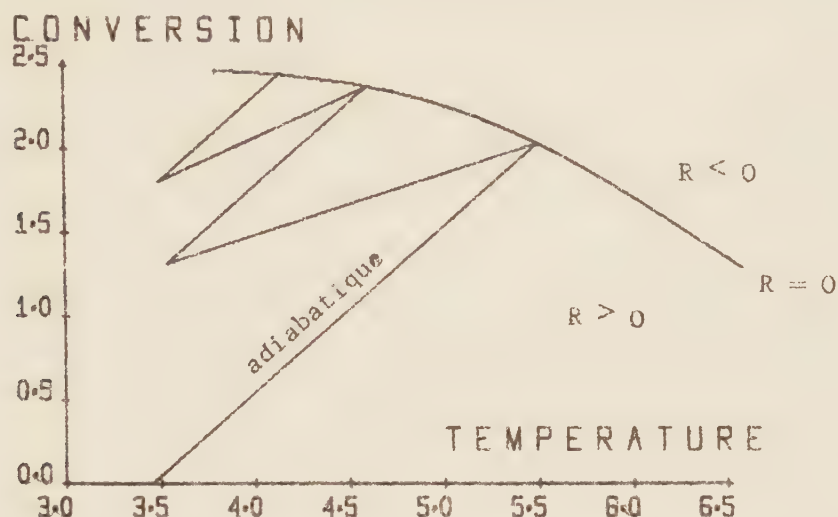


Fig. I.1.3 - Refroidissement par injection de réactifs frais

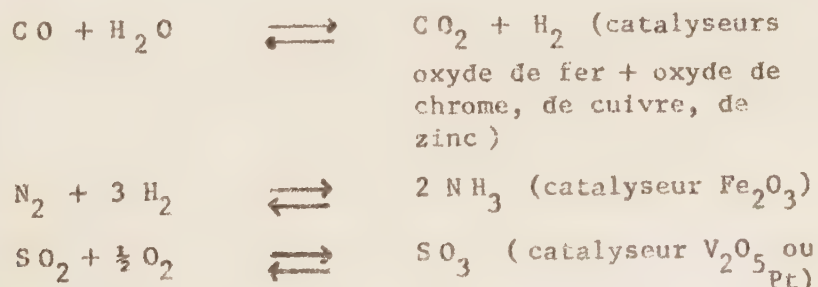
Le point (g_{i-1}, T_{i-1}) peut être déterminé à partir de l'équation suivante, classique en théorie des réacteurs :

$$\frac{T_{i-1}}{T'_i} = \frac{g_{i-1}}{g'_i} = \frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}}$$

où $\lambda_i G$ est la fraction, traversant le lit i , du débit massique total G .

I.1.2 - Exemples industriels d'utilisation de ces réacteurs

Les réacteurs de ce type sont utilisés pour la réalisation industrielle des réactions suivantes :



Nous nous sommes plus particulièrement intéressés à cette dernière réaction dont nous avons déjà souligné la grande importance . Cette réaction ayant déjà été utilisée par de nombreux auteurs, il nous a été possible de comparer les résultats obtenus . Mais il faut noter que ce choix, comme celui d'une cinétique que nous effectuons ultérieurement, ne restreint pas le domaine d'application de notre méthode d'optimisation .

I.2 - La mise en équation du problème . Difficultés de résolution

I.2.1 - Les cinétiques de l'oxydation de l'anhydride sulfureux

On pourrait penser que la cinétique d'une réaction aussi connue que celle de l'oxydation de l'anhydride sulfureux est parfaitement déterminée . En fait, concernant ce sujet, S. WEYCHERT et A. URBANECK [1] ont analysé 34 publications dont 24 se rapportent à l'utilisation de catalyseurs à base d'oxyde de vanadium . De leurs travaux, il ressort qu'il n'existe pas actuellement une équation décrivant cette réaction dans tous les cas d'utilisation industrielle . Il convient donc de choisir la cinétique correspondant aux conditions dans lesquelles sera effectuée la réaction .

Nous avons adopté pour nos applications numériques la cinétique de P.H. CALDERBANK [2] qui est celle utilisée pour les travaux dont nous comparons les résultats avec les nôtres au paragraphe II.1.1. Cette cinétique couvre le domaine de conversion de 0 à 100 % pour un catalyseur dont les grains ont un diamètre compris entre 1,17 et 1,65 mm et qui contient 11,3 % de pentoxyde de vanadium . La vitesse linéaire d'écoulement des gaz doit être comprise entre 0,024 et 0,032 m/s .

CALDERBANK propose comme expression de la vitesse de réaction :

$$R = k_1 P_{SO_2}^{\frac{1}{2}} P_{O_2} - k_2 P_{SO_3} P_{O_2}^{\frac{1}{2}} P_{SO_2}^{-\frac{1}{2}}$$

k_1 et k_2 sont des constantes déterminées par une régression à partir de résultats expérimentaux . P_{SO_2} , P_{O_2} , P_{SO_3} sont les pressions partielles des différents constituants du mélange .

Nous allons établir la relation donnant la vitesse en fonction de la température et de la conversion . Définissons cette conversion comme étant le nombre de moles formées par unité de masse du mélange :

$$g = \frac{n}{M} \quad \frac{\text{nombre de moles transformées}}{\text{Masse du mélange}}$$

$$[g] = \text{mole} \times \text{kg}^{-1}$$

Au cours de la réaction, le nombre de moles des différents constituants varie ; si initialement nous avons :

$$\begin{aligned} n_1^0 & \text{ moles de } \text{SO}_2 \\ n_2^0 & \text{ moles de } \text{O}_2 \\ n_3^0 & \text{ moles de } \text{SO}_3 \\ n_I^0 & \text{ moles de } \text{N}_2 \text{ et de gaz inertes} \end{aligned}$$

au cours de la réaction, nous avons :

$$\begin{aligned} n_1 &= n_1^0 - g \cdot M & \text{moles de } \text{SO}_2 \\ n_2 &= n_2^0 - \frac{g \cdot M}{2} & \text{moles de } \text{O}_2 \\ n_3 &= n_3^0 + g \cdot M & \text{moles de } \text{SO}_3 \\ n_I &= n_I^0 & \text{moles de } \text{N}_2 \text{ et de gaz inertes} \end{aligned} \quad (1.2.1.1.)$$

Notons P_o la pression totale du mélange supposée constante au cours de la réaction et égale à 1 Pascal .

Posons :

$$a_o = \frac{n_1^0 + n_2^0 + n_I^0}{M} \quad a_1 = \frac{n_1^0}{M} \quad \text{et} \quad a_2 = \frac{n_2^0}{M}$$

en admettant qu'il n'y a pas d'anhydride sulfurique dans le mélange initial ($n_3^0 = 0$)

En appliquant la loi de Mariotte, on vérifie facilement que :

$$\begin{aligned} P_{\text{SO}_2} &= \frac{P_o (a_1 - g)}{(a_o - \frac{g}{2})} \\ P_{\text{O}_2} &= \frac{P_o (a_2 - \frac{g}{2})}{(a_o - \frac{g}{2})} \\ P_{\text{SO}_3} &= \frac{P_o g}{(a_o - \frac{g}{2})} \end{aligned}$$

ce qui nous permet d'écrire :

$$R = k_1 (a_o - 0,5 g)^{-3/2} (a_1 - g)^{1/2} (a_2 - 0,5 g) - k_2 g (a_o - 0,5 g)^{-1} (a_1 - g)^{-1/2} (a_2 - 0,5 g)^{1/2}$$

et avec les valeurs de k_1 et k_2 calculées par CALDERBANK .

$$\mathcal{R}(g;T) = 3,6 \times 10^6 \left[\exp \left(12,07 - \frac{31\,000}{R\,T} \right) (a_0 - 0,5\,g)^{-3/2} (a_1 - g)^{1/2} (a_2 - 0,5\,g) \right. \\ \left. - \exp \left(22,75 - \frac{53\,600}{R\,T} \right) g (a_0 - 0,5\,g)^{-1} (a_1 - g)^{-1/2} (a_2 - 0,5\,g) \right] \quad (I-2.1.2)$$

$$[\mathcal{R}] = \text{mole} \times \text{kg}^{-1} \times \text{heure}^{-1}$$

Nous disposons ainsi d'une relation qui nous permet de calculer la vitesse de réaction lorsque g et T sont donnés .

1.2.2 - Mise en équation

Pour optimiser les types de réacteurs auxquels nous nous intéressons, nous allons établir le bilan de ce qui est produit et de ce qui est dépensé au cours de la réaction . Ce bilan nous conduira par la suite à une fonction appelée quelquefois fonction profit, fonction objectif ou encore critère économique . C'est finalement l'optimisation de cette fonction que nous effectuerons . Le choix de cette fonction intervient peu dans la méthode d'optimisation que nous appliquons mais est très important si l'on veut représenter correctement le fonctionnement réel du réacteur .

1.2.2.1 Equations de fonctionnement d'un lit

Etablissons tout d'abord les équations de fonctionnement d'un lit dans le cas, le plus complexe, du refroidissement par injection de réactifs frais . Nous reprenons ici la mise en équation de LEE et ARIS [3].

Considérons donc le lit j . Si G est le débit total du mélange à l'entrée du réacteur, le débit à l'intérieur du lit j est $\lambda_j G$. Etablissons le bilan de matière pour un élément de longueur dx situé à une distance x de l'entrée :

$$\lambda_j G \frac{dg}{dx} = w R \quad (I-2.2.1)$$

où w est le poids de catalyseur par unité de longueur de lit . Ces différentes grandeurs sont exprimées dans les unités suivantes :

$$\begin{aligned} [x] &= m \\ [G] &= \text{kg} / h \\ [w] &= \text{kg} / m \end{aligned}$$

Etablissons le bilan thermique en partant de l'équation de la réaction sous la forme :



que nous écrivons :

$$\sum_{i=1}^4 \alpha_i A_i = 0$$

en posant

$$\begin{array}{llll} A_1 = \text{SO}_3 & A_2 = \text{SO}_2 & A_3 = \text{O}_2 & A_4 = \text{N}_2 \\ \alpha_1 = 1 & \alpha_2 = -1 & \alpha_3 = -\frac{1}{2} & \alpha_4 = 0 \end{array}$$

si h_i est l'enthalpie spécifique molaire de A_i , l'enthalpie totale est $\sum_{i=1}^4 n_i h_i$. Le lit étant supposé adiabatique, cette quantité est constante donc :

$$\frac{d}{dx} \sum_{i=1}^4 \frac{n_i}{M} h_i = 0$$

Cette relation conduit à :

$$- \left(\sum_{i=1}^4 \alpha_i h_i \right) \frac{dg}{dx} = \left(\sum_{i=1}^4 \frac{n_i}{M} \frac{\partial h_i}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial x}$$

en remarquant que :

$$\sum_{i=1}^4 \alpha_i h_i = \Delta H \text{ chaleur de réaction}$$

et que :

$$\sum_{i=1}^4 \frac{n_i}{M} \frac{\partial h_i}{\partial T} = C_p \text{ chaleur spécifique du mélange}$$

nous obtenons :

$$- \Delta H \frac{dg}{dx} = C_p \frac{dT}{dx}$$

$$\lambda_j G \frac{dT}{dx} = - \frac{\Delta H}{C_p} \omega R \quad (\text{I-2.2.2})$$

de (I.2.2.1) et (I.2.2.2), déduisons :

$$\frac{dT}{dg} = - \frac{\Delta H}{C_p} \quad (\text{I-2.2.3})$$

$-\frac{\Delta H}{C_p}$ est fonction de g et T . Dans un premier temps, nous faisons l'hypothèse que cette quantité varie peu avec g et que nous pouvons écrire :

$$-\frac{\Delta H}{C_p} = J(T)$$

Nous définissons alors une nouvelle variable de température t telle que :

$$t = \int_{T_0}^T \frac{dT}{J(T)}$$

où T_0 est la température du mélange à l'entrée du réacteur .

Si nous supposons que $J(T)$ varie peu avec T , nous pouvons écrire que :

$$t = \frac{T - T_0}{J}$$

avec cette nouvelle variable de température, la relation (I.2.2.3) s'écrit :

$$\frac{dt}{dg} = 1 \quad (I.2.2.4)$$

Si g_j et t_j sont la conversion et la température réduite à l'entrée du lit j , par intégration de (I.2.2.4), nous obtenons :

$$t = g + (t_j - g_j) \quad (I.2.2.5)$$

Cette relation est valable entre autres pour $t = t'_j$ et $g = g'_j$, soit :

$$t'_j = g'_j + t_j - g_j$$

ou

$$t'_j - g'_j = t_j - g_j \quad (I.2.2.6)$$

Ces différentes relations vont nous permettre d'établir la fonction objectif que nous recherchons .

I.2.2.2 Fonction objectif dans le cas du refroidissement par injection de réactif frais

Nous allons faire intervenir trois termes dans l'expression de notre fonction objectif . Le premier représente l'accroissement de valeur du mélange après conversion de SO_2 en SO_3 . Le second représente le coût des différentes quantités de catalyseur que l'on doit disposer dans les lits et qui doit être amorti compte tenu d'une certaine fréquence de remplacement . Le troisième terme fait intervenir le coût de préchauffage du mélange entrant dans le premier lit (numéroté N) .

Si nous supposons que la valeur du mélange est égale à la somme des valeurs de ses constituants et si V_i est la valeur d'une mole de A_i la valeur, par unité de masse du mélange, est :

$$\sum_{i=1}^4 \frac{n_i}{M} V_i$$

or compte-tenu de (I-2.1.1), nous avons :

$$\sum_{i=1}^4 \frac{n_i}{M} = \sum_{i=1}^4 \frac{n_i^0}{M} + g \sum_{i=1}^4 \alpha_i$$

donc

$$\sum_{i=1}^4 \frac{n_i}{M} V_i = \sum_{i=1}^N \frac{n_i^0}{M} V_i + g \sum_{i=1}^4 \alpha_i V_i$$

La conversion g_N étant nulle à l'entrée du premier lit et valant g_1' à la sortie du dernier, l'accroissement de valeur pour un débit G est :

$$G g_1' \sum_{i=1}^4 \alpha_i V_i = G g_1' \beta \quad (\text{I-2.2.7})$$

$$\text{en posant } \sum_{i=1}^4 \alpha_i V_i = \beta$$

Pour obtenir le poids de catalyseur nécessaire dans le lit j , nous intégrons (I-2.2.1)

$$\lambda_j G \int_{g_j}^{g_j'} \frac{dg}{\mathcal{R}(g,t)} = w L_j = W_j$$

où L_j est la longueur du lit j .

Si le coût de l'amortissement du catalyseur est γ par unité de masse, la dépense totale due à la quantité de catalyseur utilisée est :

$$\gamma \sum_{j=1}^N W_j \quad (\text{I-2.2.8})$$

Le coût de préchauffage du mélange entrant dans le lit N est :

$$k \lambda_N G C_p (T_N - T_0) = k C_p G J \lambda_N t_N \quad (\text{I-2.2.9})$$

où k est une constante dépendant du prix de l'unité de quantité de chaleur.

Si nous regroupons (I.2.2.7) (I.2.2.8) et (I.2.2.9) et si nous posons $\delta = \frac{\gamma}{\beta}$ et $\mu = k C_p J/\beta$ nous obtenons la fonction profit :

$$F_1 = \frac{\text{Profit total}}{G.\beta} = g_1' - \delta \sum_{j=1}^N \lambda_j \int_{g_j}^{g_j'} \frac{dg}{R_j(g)} - \mu \lambda_N t_N \quad (\text{I.2.2.10})$$

Remarque : Nous avons établi l'expression de la vitesse de réaction sous la forme $R(g,t)$ (équation I.2.1.2) . En tenant compte de (I.2.2.5), nous remarquons que la vitesse ne dépend que de g et du lit j considéré . Nous la notons donc $R_j(g)$.

I.2.2.3 Fonction objectif dans le cas du refroidissement par échangeurs

Ce que nous avons écrit au paragraphe précédent reste vrai dans le cas du refroidissement par échangeurs , si nous prenons $\lambda_j = 1$ et si l'on tient compte du coût de ces échangeurs . Nous avons choisi ce coût proportionnel à la différence de température qui doit être obtenue . Nous avons donc adopté la fonction objectif suivante :

$$F_2 = \frac{\text{Profit total}}{G.\beta} = g_1' - \delta \sum_{j=1}^N \int_{g_j}^{g_j'} \frac{dg}{R_j(g)} - \mu t_N - \sum_{j=1}^{N-1} \mu' (t_{j+1}' - t_j) \quad (\text{I.2.2.11})$$

I.2.2.4 Difficultés du problème

Les principales difficultés du problème sont dues au nombre élevé de variables de décision dont nous devons calculer les valeurs pour définir notre réacteur . Le calcul des intégrales qui figurent dans l'expression de la fonction objectif crée également des difficultés tant du point de vue de la méthode d'intégration numérique à utiliser, que du temps de calcul demandé .

Intéressons nous tout d'abord au problème posé par le nombre élevé des variables . Pour déterminer entièrement notre réacteur dans le cas du refroidissement par injection de réactif frais, nous calculons :

g_i	pour	$i = 1 \text{ à } N-1$	car $g_N = 0$
t_i	pour	$i = 1 \text{ à } N$	
g_i'	pour	$i = 1 \text{ à } N$	
t_i'	pour	$i = 1 \text{ à } N$	
λ_i	pour	$i = 2 \text{ à } N$	car $\lambda_1 = 1$

soit donc au total $5N - 2$ inconnues . Nous disposons des relations suivantes préalablement établies :

$$\begin{aligned} t &= g + t_i - g_i && \text{pour } i = 1 \text{ à } N \\ \lambda_i g_i &= \lambda_{i+1} g'_{i+1} && \text{pour } i = 1 \text{ à } N - 1 \\ \lambda_i t_i &= \lambda_{i+1} t'_{i+1} && \text{pour } i = 1 \text{ à } N - 1 \end{aligned}$$

soit au total $3N - 2$ relations . La fonction objectif (I.2.2.10) est donc une fonction de $2N$ variables de décision .

Dans le cas du réacteur à refroidissement intermédiaire par échangeurs, le nombre de variables à déterminer est moins important car les λ_i n'existent pas . En contre partie, nous ne disposons pas des relations reliant (g_i, t_i) aux (g'_i, t'_i) par l'intermédiaire des λ_i . Nous vérifions ainsi que le nombre des variables de décision reste $2N$ pour un réacteur à N lits .

L'accroissement des difficultés, lorsque le nombre des variables de décision augmente, est tel que BELLMAN [14] a pu parler du "fléau de la dimensionalité" . Les chances que nous avons de nous trouver en présence d'un maximum unique diminuent . Le temps de calcul devient rapidement prohibitif . En effet, nous pouvons admettre que par une méthode de recherche directe (nombre d'or, méthode du gradient, des directions conjuguées, de Rosenbrock ...) il faut en moyenne calculer 10^{2N} fois la valeur de la fonction objectif . Dans le cas d'un réacteur à trois lits, il faudrait donc calculer environ 10^6 fois la valeur de l'expression (I-2.2.10) ou de l'expression (I-2.2.11) suivant le mode de refroidissement adopté . Le temps de calcul pour l'une ou l'autre de ces expressions étant d'environ une seconde sur l'ordinateur IBM 1800, il faudrait à peu près onze jours pour résoudre le problème de l'optimisation du réacteur à trois lits .

Le temps de calcul relativement important demandé pour l'évaluation de la valeur de la fonction objectif est dû à la présence des intégrales $\int_{g_i}^{g'_i} \frac{dg}{R_i(g)}$. Nous avons représenté (figure I.2.1) les variations de $1/R_i(g)$, dans le cas d'un réacteur optimum à trois lits . Les méthodes d'intégration utilisant une interpolation de la fonction à intégrer sur des points équidistants (méthodes de COTES) ne donnent pas de bons résultats tant au point de vue précision que durée des calculs . En effet, ces méthodes interpolent la fonction à intégrer par des polynômes $\sum_{i=1}^N a_i x^i$ sur une base de points équidistants .

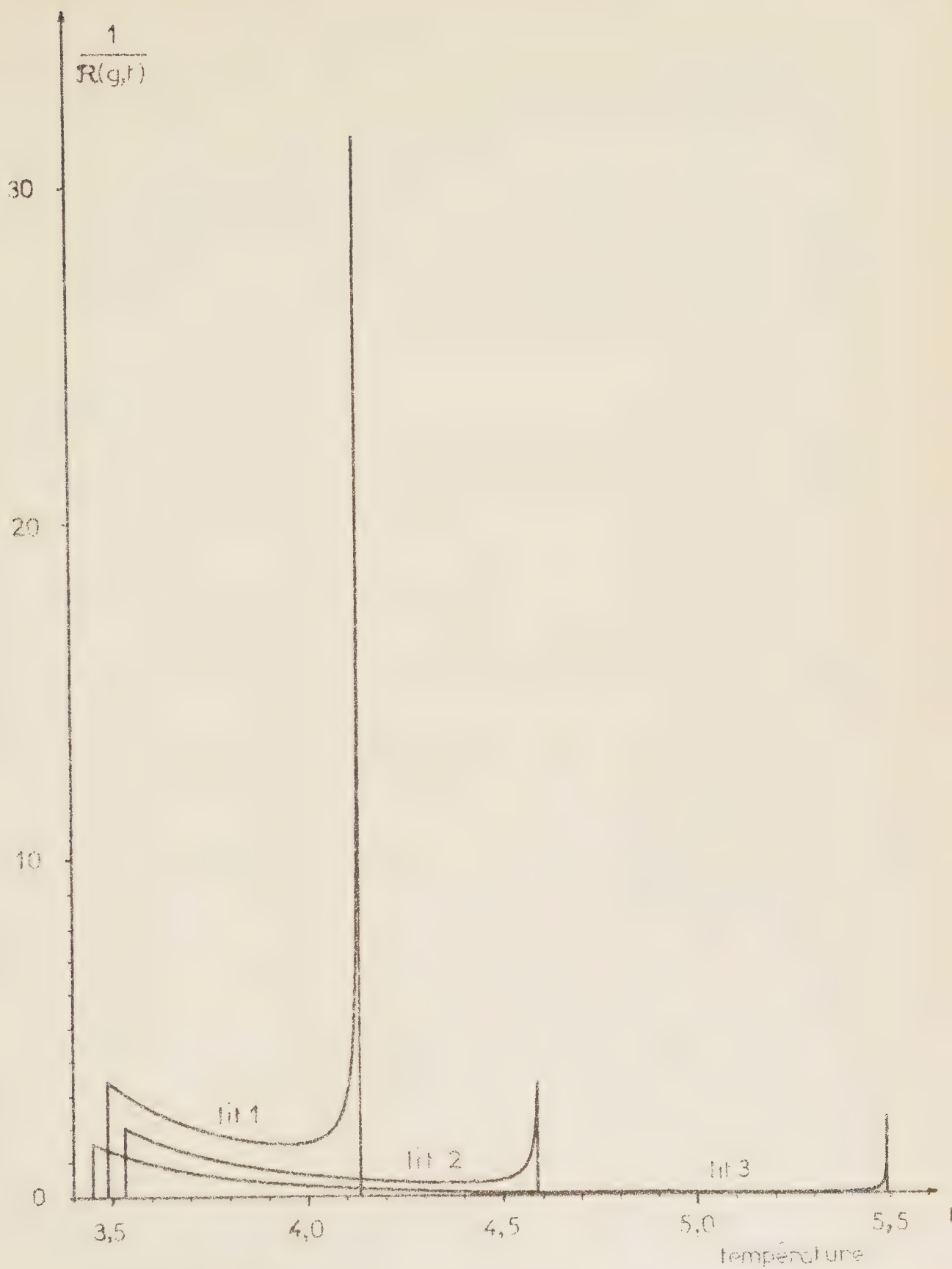


Figure 1.2.1 - Variation de la fonction $\frac{1}{R(g,t)}$ dans les trois lits du réacteur optimum

La quantité d'information utilisée est la même dans les intervalles où la fonction varie beaucoup et dans les intervalles où elle varie peu . Les polynômes $\sum_{i=1}^N a_i x^i$ font intervenir des puissances de x qui peuvent être très grandes et introduire ainsi des erreurs d'arrondi très importantes . Nous avons donc mis en oeuvre une méthode utilisant l'interpolation de la fonction à intégrer par des polynômes de TCHEBYCHEFF . Dans cette méthode, les points d'interpolation sont plus nombreux aux extrémités de l'intervalle d'intégration (voir annexe 1) et l'on dispose ainsi de plus d'informations dans les domaines où les variations de la fonction à intégrer sont importantes .

1.3 Bibliographie

La bibliographie est assez fournie . Nous donnons en annexe la liste des ouvrages et publications concernant ce sujet . Nous ne résumons ici que ceux des travaux qui ont inspiré les nôtres ou qui ont permis des comparaisons de résultats .

1.3.1 - Ouvrages généraux

ARIS [7] étudie les applications de la méthode de la programmation dynamique à l'optimisation des réacteurs chimiques au stade du projet .

Ainsi pour un réacteur à deux étages, le principe de BELLMANN [14] lui permet d'écrire :

$$\left[\begin{array}{c} \text{Profit maximum} \\ \text{pour 2 étages} \end{array} \right] = \text{maximum de } \left\{ \left[\begin{array}{c} \text{profit} \\ \text{du} \\ \text{2e étage} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{profit maximum} \\ \text{du premier éta-} \\ \text{ge avec l'ali-} \\ \text{mentation pro-} \\ \text{duite par le} \\ \text{2eme étage} \end{array} \right] \right\}$$

la numérotation adoptée étant la suivante :



Ce principe est tout d'abord appliqué par ARIS à l'étude du réacteur à refroidissement par échangeurs puis à l'étude du réacteur à refroidissement par injection de réactifs frais . ARIS utilise la relation mise en lumière par KONOKI [17] en 1957 selon laquelle la vitesse de réaction à la sortie d'un lit doit être la même que celle à l'entrée du lit suivant .

Par le calcul de la dérivée de la fonction objectif par rapport à la conversion de sortie, ARIS montre que la vitesse de la réaction à la sortie du lit n° 1 doit être égale au paramètre économique que nous avons appelé δ .

L'application du principe de la programmation dynamique dans le cas du refroidissement par injection de réactifs frais n'est pas correctement effectuée par ARIS. Cette erreur est d'ailleurs répétée dans la publication de LEE et ARIS [3] que nous analysons plus en détail dans le paragraphe 1.3.2.

Dans son ouvrage, ARIS étudie le cas des réacteurs où ont lieu plusieurs réactions simultanées et le cas des réacteurs refroidis par injection d'un gaz frais étranger à la réaction. Il envisage le contrôle optimal des réacteurs dans le cas, entre autres, où l'activité du catalyseur varie. Ce dernier point a été repris et développé dans une autre publication de LEE et ARIS [15] que nous analysons également au paragraphe 1.3.2.

En résumé, cet ouvrage, s'il ne les résout pas toujours correctement, a l'avantage de bien poser les problèmes de l'optimisation des réacteurs chimiques.

La thèse de PINGAULT [9] est consacrée à l'optimisation des systèmes étagés avec application à l'étude d'un système de cellules catalytiques adiabatiques dans divers cas de refroidissement.

L'auteur présente les diverses méthodes susceptibles d'être utilisées pour la résolution du problème posé :

- méthodes de recherche directe
- méthode analytique (calcul des dérivées) dans le cas du refroidissement par échangeurs
- méthode de la programmation dynamique.

Il propose ensuite une méthode originale, applicable aux différents modes de refroidissement. Cette méthode, dérivée de la programmation dynamique utilise la forme particulière de la fonction objectif choisie pour diminuer le nombre des calculs demandés par la programmation dynamique. Nous n'effectuons pas de comparaison entre les résultats de PINGAULT et les nôtres car les fonctions objectifs sont différentes, les résultats concernent essentiellement des réacteurs utilisant simultanément plusieurs modes de refroidissement, et surtout les temps de calcul ne sont pas donnés.

I.3.2 Ouvrages se rapportant au problème du refroidissement par échangeurs intermédiaires

En 1957, KONOKI [17], obtient, en utilisant le calcul des dérivées de la fonction objectif, deux relations qui lui permettent de résoudre graphiquement le problème de l'optimisation d'un réacteur catalytique adiabatique à trois lits utilisé pour la conversion de l'oxyde de carbone. Avec nos notations, ces deux relations s'écrivent :

$$R(g_i^1, t_i^1) = R(g_{i+1}, t_{i+1}) \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (I-3.2.1)$$

$$\int_{g_i}^{g_i^1} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{R(g, t)} \right] dg = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (I-3.2.2)$$

On retrouve l'exposé de cette méthode basée sur le calcul différentiel dans la publication de RAFAL et DRANOFF [4]. La fonction objectif adoptée par ces auteurs, identique d'ailleurs à celle de KONOKI, ne tient pas compte du coût du préchauffage. RAFAL et DRANOFF proposent un algorithme de calcul sur ordinateur utilisant les relations mises en lumière par KONOKI. Après avoir rappelé le principe de la programmation dynamique, ils proposent un algorithme dérivé de cette dernière méthode et qui utilise les relations (I-3.2.1) et (I-3.2.2) pour diminuer le nombre des calculs demandés. Ils appliquent cet algorithme à la réaction de conversion de l'oxyde de carbone.

FAN et WANG [16] étudient dans leur ouvrage "The discrete maximum principle" l'application du principe de Pontryagin à l'optimisation d'un réacteur à plusieurs lits catalytiques adiabatiques à refroidissement intermédiaire par échangeurs.

L'application du principe de Pontryagin les conduit à des relations identiques à celles données par KONOKI et l'algorithme de calcul qu'ils en déduisent est semblable à celui de RAFAL et DRANOFF.

I.3.3 Ouvrages se rapportant au problème du refroidissement par injection de réactif frais

Parmi les publications concernant ce problème, nous nous sommes particulièrement intéressés à celle de LEE et ARIS [3]. Cette publication est à l'origine de nos travaux. Les auteurs, utilisant les techniques de la programmation dynamique, présentent un algorithme permettant l'optimisation d'un réacteur à trois lits. MALENGE [10] releva une erreur dans l'application du principe de BELLMANN. Il montra avec OSTROVSKY [20] que l'utilisation d'une méthode de recherche directe (ROSENBROCK), si elle ne conduisait pas à l'optimum permettait d'améliorer substantiellement les résultats obtenus par LEE et ARIS.

L'erreur signalée par MALENGE¹ fut également relevée quelques mois plus tard par FERRARIS [11] qui affirmait obtenir rapidement l'optimum par une méthode de recherche directe . En fait, ce chercheur n'obtenait pas l'optimum et n'améliorait le profit obtenu par MALENGE que grâce à l'influence de différences sur les coefficients de la cinétique de CALDERBANK . FERRARIS conservait les coefficients, légèrement arrondis, de LEE et ARIS, alors que MALENGE avait utilisé des valeurs non arrondies . Nous montrons d'ailleurs au chapitre III la très grande influence de ces coefficients sur les résultats obtenus. HELLINCKX et VAN ROMPAY [12] publient en octobre 1968 une note dans laquelle ils montrent comment, en utilisant le principe de PONTRYAGIN, ils résolvent le problème au prix toutefois de quarante minutes d'ordinateur IBM 360 . A cette même date, nous avons mis au point notre méthode qui conduit au même optimum en trois minutes de calcul du même ordinateur et MALENGE [13] publiait en décembre 1968 les bases théoriques de cette méthode .

On peut également remarquer que c'est à la même époque (février 1969) que DYSON et HORN [8] décrivaient un algorithme semblable au nôtre . Bien que citant les travaux de LEE et ARIS, ils ne traitaient pas le même exemple contrairement aux autres chercheurs et à nous-mêmes .

En décembre 1969, MALENGE¹ [23] publie un résumé des différentes correspondances qui ont suivi la publication de LEE et ARIS et commente la dernière en date, celle de BHANDARKAR et NARSIMHAN [18] . Ces auteurs voulant optimiser un réacteur à deux lits, calculent les dérivées de la fonction objectif par rapport aux variables de décision . Ils obtiennent la relation (I.3.2.1), mais négligent dans la suite des calculs d'exprimer la vitesse de réaction en fonction des variables de décision, ce qui les conduit à des résultats faux .

En avril 1970, HELLINCKX et VAN ROMPAY [22] présentent les résultats de leurs derniers travaux sur les réacteurs adiabatiques à plusieurs lits . Ayant obtenu la solution du problème de l'optimisation du réacteur, les auteurs étudient l'influence des variations des paramètres économiques sur la politique optimale . Deux méthodes peuvent être mises en oeuvre pour cette étude :

- calculer la politique optimale pour des valeurs voisines des coefficients économiques ,
- effectuer une analyse théorique de la sensibilité de la solution optimale aux variations des coefficients économiques .

La première méthode est rejetée par HELLINCKX et VAN ROMPAY car elle demande un temps de calcul sur ordinateur trop important. Il faut en effet se souvenir que la méthode d'optimisation qu'ils mettent en oeuvre demande quarante minutes de calcul sur IBM 360 pour un réacteur à trois lits. Les auteurs ont donc utilisé la seconde méthode pour effectuer cette étude. Nous-mêmes étudions l'influence des variations des paramètres économiques au Chapitre II. Notre algorithme de calcul présentant la qualité principale d'être très rapide, nous avons mis en oeuvre la première méthode d'étude.

Par cette brève analyse des travaux les plus marquants, on peut prendre conscience de l'importance du sujet et de l'intérêt que soulève actuellement la recherche de sa solution.

CHAPITRE II

ETUDE AU STADE PROJET

Introduction

II.1 - Réacteur à refroidissement par injection de réactifs frais

II.1.1 - Optimisation sans contrainte

II.1.1.1 - Développement analytique. Calcul des dérivées

II.1.1.2 - Programmation

II.1.1.3 - Résultats de l'optimisation du réacteur

II.1.1.4 - Variations des paramètres économiques δ et μ

II.1.1.5 - Variations du nombre de lits

II.1.2 - Analyse post-optimale

II.1.3 - Optimisation en présence de contraintes

II.1.3.1 - Conversion de sortie fixée

II.1.3.2 - Contrainte sur les températures de sortie des
lits

II.2 - Réacteur à refroidissement par échangeurs

II.2.1 - Développement analytique

II.2.2 - Programmation. Résultats

II.2.3 - Contraintes sur la conversion de sortie ou sur les tempé-
ratures de sortie des lits

Conclusion

CHAPITRE II

ETUDE AU STADE PROJET

Lorsqu'on veut établir le projet d'un réacteur catalytique à lits multiples, de nombreux choix doivent être faits. La plupart d'entre eux sont influencés par le contexte économique : capacité de production de l'unité, choix du catalyseur, choix du mode de refroidissement,...

Malgré cela, il reste au bureau d'étude à déterminer les valeurs à donner à de nombreux paramètres. Les réalisations antérieures et les améliorations que leur exploitation a pu suggérer dirigent partiellement l'ingénieur dans son étude. Le recours aux ordinateurs s'avère néanmoins nécessaire si l'on veut optimiser totalement le processus et évaluer l'influence des perturbations qui peuvent affecter l'installation au cours de son fonctionnement. La phase de mise en forme du modèle mathématique du processus ayant été exposé au chapitre précédent, nous présentons maintenant une méthode qui permet d'obtenir rapidement les paramètres du réacteur optimum dans deux cas de refroidissement : injection de réactif frais puis refroidissement par échangeurs intermédiaires.

II.1 - Réacteurs à refroidissement par injection de réactifs frais

Ce système de refroidissement présente l'avantage de la simplicité, du point de vue de la réalisation pratique.

Nous étudions tout d'abord l'optimisation du réacteur en l'absence de contraintes, nous réservant d'étudier ensuite le cas où des contraintes sont imposées :

* températures de sortie des lits limitées par les propriétés physicochimiques du catalyseur,

* taux de conversion à la sortie du réacteur fixé a priori.

II.1.1 - Optimisation sans contrainte

Nous avons déjà signalé que de nombreux auteurs s'étaient intéressés à ce problème. Aucun d'entre eux n'a proposé la méthode très simple que nous présentons ici et qui consiste à transformer un problème de recherche à $2N$ variables en $2N$ problèmes de recherche à une variable en utilisant les relations obtenues à partir du calcul et de l'annulation des dérivées premières de la fonction objectif par rapport aux variables de décision. Le grand intérêt de cette transformation est de diminuer le nombre de calculs de la fonction objectif nécessaire à l'obtention de l'optimum. Au paragraphe I.2.2.4, nous avons évalué à 10^{2N} le nombre de ces calculs, ce qui nous demandait environ onze jours de calcul pour l'optimisation du réacteur à trois lits avec l'ordinateur IBM 1800 ; avec notre méthode, le nombre de calculs serait seulement de $10 \times 2N$. Pour le même exemple et avec le même ordinateur, une minute seulement de calculs suffirait. Nous montrerons dans le paragraphe suivant que nous ne sommes pas tout à fait arrivé à ce résultat : l'une des dérivées que nous calculons nous fournit en effet une relation qui dépend de toutes les variables de décision adoptées. De ce fait, elle ne peut être facilement exploitée. Le nombre de calculs nécessaires est alors de $10 \times (2N - 1) \times 10$, ce qui correspond à un temps de calcul d'environ huit minutes que nous avons effectivement obtenu.

II.1.1.1 - Développement analytique. Calcul des dérivées

Le modèle mathématique adopté au chapitre I pour représenter la fonction économique du réacteur est :

$$F_1 = g_1^* - \delta \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{g_i}^{g_i^*} \frac{dg}{R_i(g)} - \mu \lambda_N t_N \quad (II.1.1)$$

Nous avons montré au chapitre I que cette fonction dépendait de $2N$ variables. Les variables que le responsable du projet demande de déterminer sont : la longueur des lits (ou, ce qui est équivalent, la quantité W_i de catalyseur à déposer dans chaque lit), la température du mélange t_N après le préchauffage, et les valeurs des débits λ_i dans chacun des lits. Si nous choisissons ces variables "naturelles" comme variables de décision, nous obtenons des expressions de dérivées pratiquement inutilisables.

C'est probablement la raison pour laquelle cette méthode n'avait jamais été proposée pour résoudre le problème qui nous intéresse. Nous avons donc été amené à choisir, aussi astucieusement que nous le suggérerait la forme de la fonction objectif, $2N$ variables de décision se prêtant mieux au calcul des dérivées et donnant des relations plus facilement exploitables. Après plusieurs essais nous avons finalement utilisé les variables suivantes :

- $g'_i \quad i = 1, N \quad (\text{conversion à la sortie du lit})$
- $\lambda_N \quad t_N = z \quad (\text{qui caractérise la quantité de chaleur fournie au préchauffage})$
- $\lambda_i \quad i = 2, N-1 \quad (\text{fraction du débit du mélange traversant le lit})$
- $t_N \quad (\text{température du mélange entrant dans le lit } N)$

Ecrivons la fonction objectif F_1 en fonction de ces variables de décision :

$$F_1 = g'_1 - \delta \frac{z}{t_N} \int_0^{g'_N} \frac{dg}{R_N(g)} - \delta \lambda_{N-1} \int_{\frac{z g'_N}{\lambda_{N-1} t_N}}^{g'_{N-1}} \frac{dg}{R_{N-1}(g)} - \delta \sum_{i=1}^{N-2} \lambda_i \int_{\frac{\lambda_{i+1} g'_{i+1}}{\lambda_i}}^{g'_i} \frac{dg}{R_i(g)} - \mu z \quad (11.1.2)$$

Précisons ici l'écriture $R_i(g)$ de la vitesse de réaction que nous avons déjà adoptée au premier chapitre.

A l'intérieur du lit i nous avons :

$$t = g + t_i - g_i \quad (11.1.3)$$

Nous pouvons montrer facilement que :

$$t_i - g_i = \frac{z}{\lambda_i}$$

En effet :

$$\begin{aligned} t_i - g_i &= \frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_i} (t'_{i+1} - g'_{i+1}) \\ &= \frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_i} (t_{i+1} - g_{i+1}) \\ &= \frac{\lambda_{i+2}}{\lambda_i} (t'_{i+2} - g'_{i+2}) \\ &\dots \dots \dots \\ &= \frac{\lambda_N}{\lambda_i} (t_N - g_N) \end{aligned}$$

comme $g_N = 0$, nous avons bien :

$$t_i - g_i = \frac{z}{\lambda_i} \quad (\text{II.1.4})$$

soit donc :

$$\mathcal{R}(g, g + \frac{z}{\lambda_i}) = R_i(g) \quad i \text{ variant de } 1 \text{ à } N \quad (\text{II.1.5})$$

Si nous annulons les dérivées premières de la fonction objectif par rapport aux variables de décision, nous obtenons les conditions nécessaires de stationnarité suivantes :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial g'_1} = 1 - \frac{\delta \lambda_1}{R_1(g'_1)} = 0$$

or $\lambda_1 = 1$; nous obtenons donc la relation :

$$\boxed{R_1(g'_1) = \delta} \quad (\text{II.1.6})$$

Cette relation a une signification du point de vue économique : arrivé à une certaine vitesse de réaction, liée au prix du catalyseur,

dans le dernier lit du réacteur, il est inutile et il serait même coûteux de poursuivre la réaction. Cette dérivée nous donne le coût marginal lié à g_1' .

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial g_i'} &= - \frac{\delta \lambda_i}{R_i(g_i')} + \frac{\delta \lambda_{i-1} \lambda_i}{\lambda_{i-1} R_{i-1}(g_{i-1})} \\ &= \frac{1}{R_{i-1}(g_{i-1})} - \frac{1}{R_i(g_i')} = 0\end{aligned}$$

soit donc :

$$\boxed{R_{i-1}(g_{i-1}) = R_i(g_i')} \quad i = 2, N \quad (\text{II.1.7})$$

Cette relation signifie qu'il y a égalité des vitesses de réaction avant et après mélange (figure II.1.1).

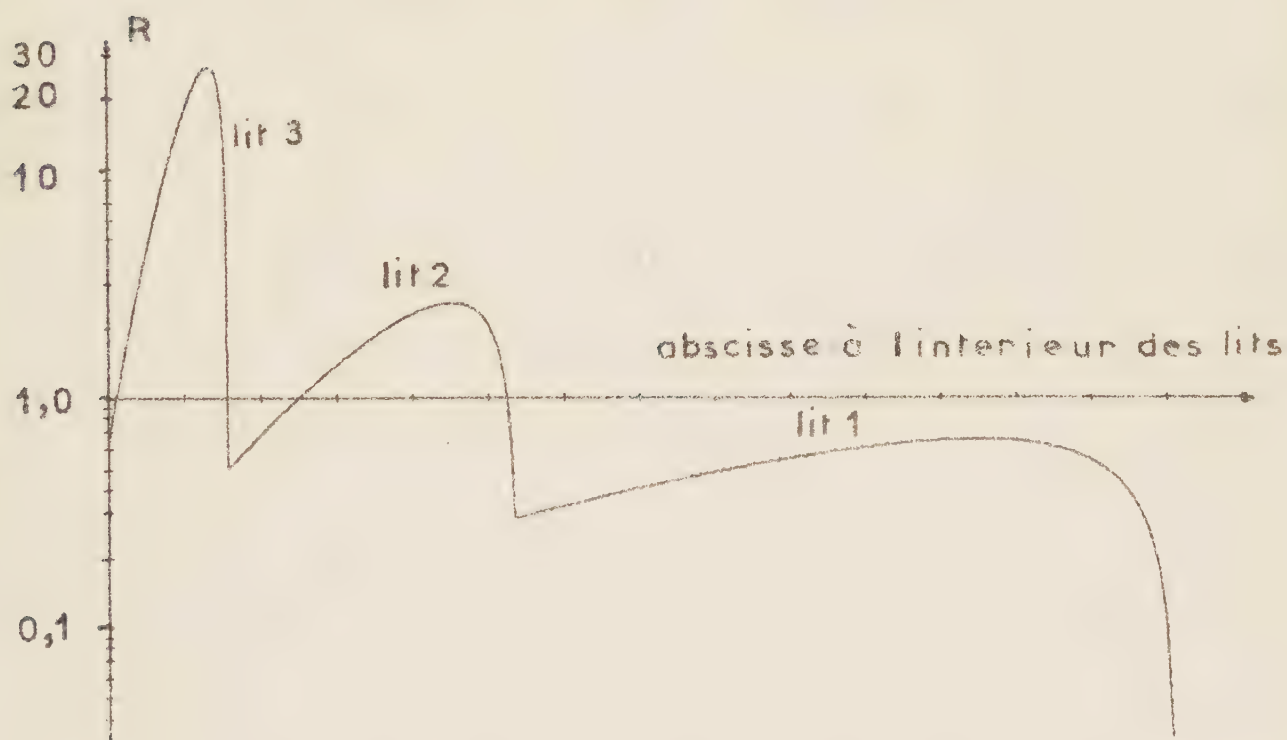


Figure II.1.1 - Variation de la vitesse de réaction dans le réacteur optimum à trois lits.

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda_i} = - \delta \int_{g_i}^{g'_i} \frac{dg}{R_i(g)} - \delta \frac{\lambda_i \lambda_{i+1}}{\lambda_i^2} \frac{g'_{i+1}}{R_i(g'_i)} - \delta \lambda_i \int_{g_i}^{g'_i} \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \left(\frac{1}{R_i(g)} \right) dg + \delta \lambda_{i-1} \frac{g'_i}{\lambda_{i-1}^2} \frac{1}{R_{i-1}(g_{i-1})} = 0$$

On vérifie facilement que :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} \left(\frac{1}{R_i(g)} \right) = - \frac{\lambda_N t_N}{\lambda_i^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\mathcal{R}(g, t)} \right)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda_i} = \frac{g_i}{R_i(g_i)} - \frac{g'_i}{R(g'_i)} + \int_{g_i}^{g'_i} \frac{dg}{R_i(g)} - \int_{g_i}^{g'_i} \frac{\lambda_N t_N}{\lambda_i^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\mathcal{R}(g, t)} \right) dg = 0$$

Le réacteur optimum devra donc vérifier la relation :

$$\boxed{\frac{g_i}{R_i(g_i)} - \frac{g'_i}{R_i(g'_i)} + \int_{g_i}^{g'_i} \left[\frac{1}{R_i(g)} + \frac{t_N - g_i}{R_i^2(g)} \frac{\partial}{\partial t} (R_i(g)) \right] dg} \quad (\text{II.1.8})$$

Cette relation est valable pour i variant de 2 à $N-1$; nous ne lui avons trouvé aucune signification physico-chimique.

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t_N} = - \frac{\delta z}{t_N} \int_0^{g'_N} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{R_N(g)} \right) dg + \frac{\delta z}{t_N^2} \int_0^{g'_N} \frac{dg}{R_N(g)} - \frac{\delta z}{t_N^2} \frac{g'_N}{R_{N-1}(g_{N-1})} = 0$$

Le réacteur optimum devra donc également vérifier la relation

$$\boxed{- \frac{g'_N}{R_N(g'_N)} + \int_0^{g'_N} \left[\frac{1}{R_N(g)} + \frac{t_N}{R_N^2(g)} \frac{\partial}{\partial t} (R_N(g)) \right] dg = 0}$$

Nous remarquons que cette relation est un cas particulier de la relation (II.1.8) (car $g_N = 0$). Nous pouvons donc considérer celle-ci comme valable de 2 à N.

$$\frac{\partial \mathfrak{F}_1}{\partial z} = - \frac{\delta}{t_N} \int_0^{g'_N} \frac{dg}{R_N(g)} + \delta \frac{g'_N}{t_N} \frac{1}{R_{N-1}(g_{N-1})} - \delta \lambda_{N-1} \int_{g_{N-1}}^{g'_{N-1}} \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{1}{R_{N-1}(g)} \right) dg$$

$$- \delta \sum_{i=1}^{N-2} \left[\lambda_i \int_{g_i}^{g'_i} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{R_i(g)} \right) dg \right] - \mu$$

$$\text{or} \quad \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{R_i(g)} \right) = \frac{1}{\lambda_i} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\mathfrak{R}(g, t)} \right) \quad \text{car} \quad t = g + \frac{z}{\lambda_i}$$

d'où :

$$\frac{\partial \mathfrak{F}_1}{\partial z} = - \frac{1}{t_N} \int_0^{g'_N} \frac{dg}{R_N(g)} + \frac{g'_N}{t_N} \frac{1}{R_{N-1}(g_{N-1})} - \sum_{i=1}^{N-1} \int_{g_i}^{g'_i} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\mathfrak{R}(g, t)} \right) dg - \frac{\mu}{\delta}$$

La relation (II.1.8) dans le cas où $i = N$ nous donne :

$$- \frac{1}{t_N} \int_0^{g'_N} \frac{dg}{R_N(g)} + \frac{g'_N}{t_N} \frac{1}{R_{N-1}(g_{N-1})} = - \int_0^{g'_N} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\mathfrak{R}(g, t)} \right) dg$$

On obtient donc la relation :

$$\boxed{\sum_{i=1}^N \int_{g_i}^{g'_i} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\mathfrak{R}(g, t)} \right) dg + \frac{\mu}{\delta} = 0} \quad (\text{II.1.9})$$

II.1.1.2 - Programmation

L'organigramme (fig. II.1.2) du programme (donné en annexe) d'optimisation du réacteur au stade projet (programme ORSP) nous permet de décrire l'utilisation pratique de ces relations.

Si nous nous donnons t_N nous pouvons chercher g_N' tel que la relation (II.1.8) soit vérifiée pour $i = N$; la relation $t_N' = g_N' + t_N$ nous permet de calculer t_N' . La valeur de la conversion et de la température après le mélange peut ensuite être trouvée en cherchant g_{N-1} tel que la relation (II.1.7) soit vérifiée. La relation :

$$\lambda_{i-1} g_{i-1} = \lambda_i g_i' \quad \text{ou} \quad \lambda_{i-1} t_{i-1} = \lambda_i t_i' \quad \text{pour} \quad i = N$$

nous donne alors la valeur du rapport λ_N/λ_{N-1} . Ces calculs peuvent ensuite être repris avec l'indice i diminué d'une unité jusqu'à ce que $i = 1$. Dans ce cas, la relation (II.1.8) est remplacée par la relation (II.1.6).

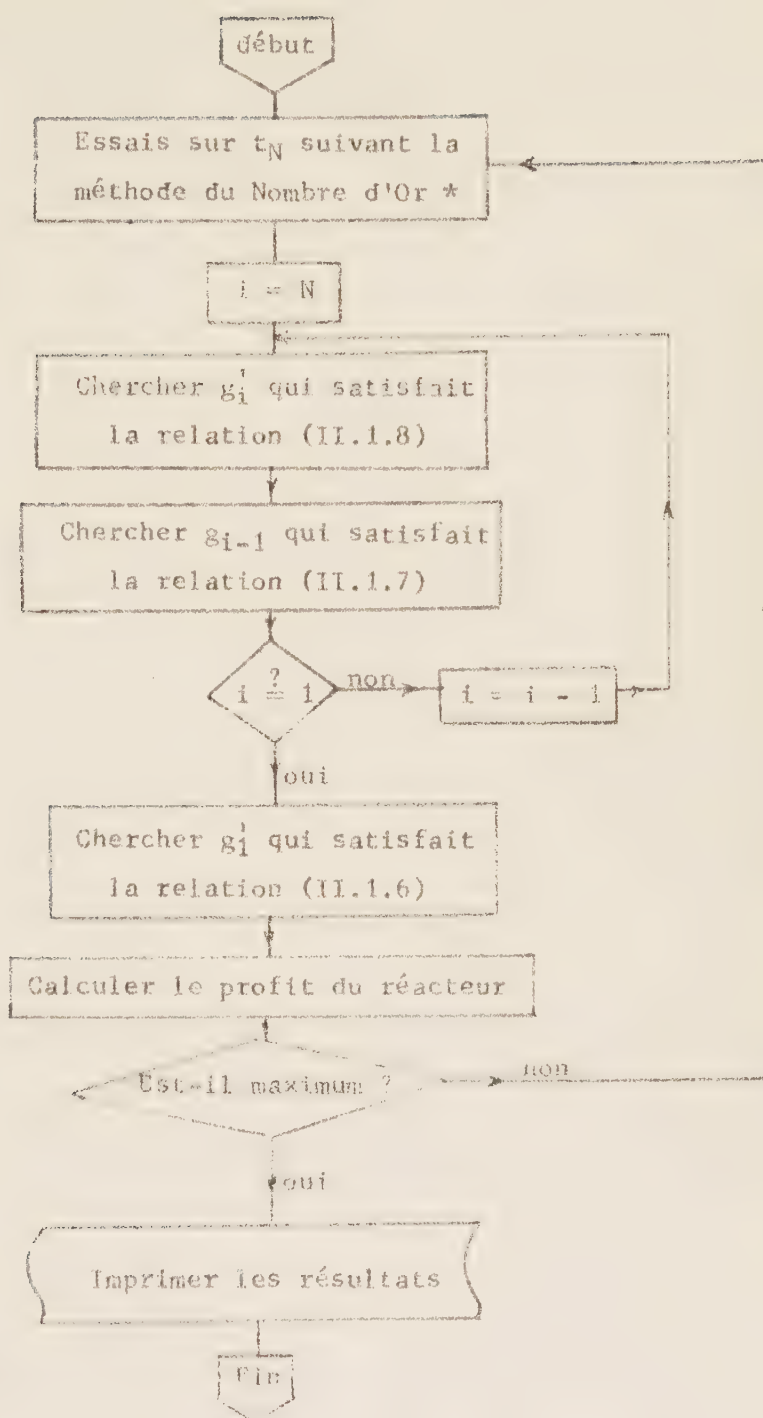
Nous disposons alors de tous les éléments nécessaires pour calculer soit la valeur de la fonction objectif soit la valeur de la relation (II.1.9). Nous devons ensuite faire varier t_N pour obtenir soit un maximum dans le premier cas, soit l'annulation de la relation (II.1.9) dans le second cas.

II.1.1.3 - Résultats de l'optimisation du réacteur

Nous avons regroupé dans le tableau II.1 les résultats obtenus par différents chercheurs et par nous-mêmes, lors de l'optimisation du réacteur traité en exemple par LEE et ARIS [3].

Ce réacteur à trois lits est prévu pour la production de 50 tonnes par jour d'acide sulfurique pur. Il est alimenté par un mélange de 7,8 % en moles de SO_2 , 10,8 % de O_2 et 81,4 % de N_2 .

Le débit du mélange entrant dans le réacteur calculé par LEE et ARIS est de 7731 kg/heure. En effectuant le calcul de ce débit, on trouve en fait 8513 kg/heure, si l'on suppose le rendement du réacteur égal à 100 %. Comme nous trouvons qu'il est en fait de 98 %, le débit exact est donc de 8680 kg/heure. Dans le tableau II.1, les poids de catalyseur en kilogrammes ont été évalués à partir du débit utilisé par LEE et ARIS, car c'est cette valeur qui avait été adoptée par les autres chercheurs. Par la suite, nous donnerons comme résultats les poids de catalyseur rapportés à l'unité de débit soit donc W/G.



* méthode du Nombre d'Or : voir annexe.

Fig. II.1.2 - Organigramme du programme ORGP

	LEE et ARIS [3]	MALENCE et VILLERMAUX [10]	HELLINCKX et VAN ROMPAY [12]	Nos résultats
λ_2	0,652	0,723	0,7572	0,7593
λ_3	0,363	0,4245	0,4870	0,4877
t_3	4,150	4,120	3,455	3,456
g_1	2,460	2,442	2,450	2,450
g_2	2,3597	2,337	2,372	2,374
g_3	1,768	1,765	2,040	2,041
W_1	41515	11835	11796	11639
W_2	7671	5104	4917	5029
W_3	212	257	2059	2085
W_T	49398	17196	18872	18753
Profit	2,036	2,107	2,122	2,122
Temps	-	-	70 mn sur IBM 360 type non précisé	10 secondes sur CII 10070

Tableau II.1 - Comparaison des résultats obtenus

Dans ce tableau, nous pouvons remarquer les grands écarts entre les valeurs des trois premières colonnes. A ce sujet, rappelons que LEE et ARIS n'appliquaient pas correctement le principe de la programmation dynamique et que MALENCE et VILLERMAUX n'avaient pas poussé leur optimisation jusqu'à sa fin pour des raisons de durée de calcul trop importante. Ils voulaient simplement montrer que le réacteur de LEE et ARIS n'était pas optimum.

L'intérêt de notre optimisation, qui fait passer la valeur de la fonction objectif de 2,036 à 2,122, n'apparaît pas clairement. Nous semblons en fait jouer sur les décimales. Mais, lorsque nous ferons varier le nombre des lits du réacteur, nous constaterons que le maximum de la valeur de la fonction objectif pour un réacteur à deux lits est de 2,037. Notre optimisation nous fait donc gagner un lit, car nous obtenons avec deux lits la même valeur que LEE et ARIS avec trois. Son intérêt apparaît alors plus clairement.

Il y a peu de différence entre les résultats d'HELLINCKX et

VAN ROMPAY et les nôtres. Seul le temps de calcul varie considérablement (notre méthode est 400 fois plus rapide), et de ce fait nous a permis d'effectuer une série d'études jusqu'alors inaccessibles.

II.1.1.4 - Variations des paramètres économiques δ et μ

Le paramètre δ lié au coût du catalyseur et le paramètre μ qui caractérise le coût de préchauffage sont évalués à partir de critères économiques qui peuvent varier avec le temps et suivant l'installation à laquelle s'applique notre algorithme. Nous avons donc fait varier μ de 0 à 0,30 pour $\delta = 0,03125$ et $\delta = 0,3125$ (reprenant en fait les valeurs numériques de l'étude effectuée par LEE et ARIS [3]). Nos résultats montrent que les variations brutales observées par ces auteurs pour $\mu = 0,09$ n'existaient pas et que au contraire ces variations étaient extrêmement régulières (figures II.1.3, II.1.4, II.1.5).

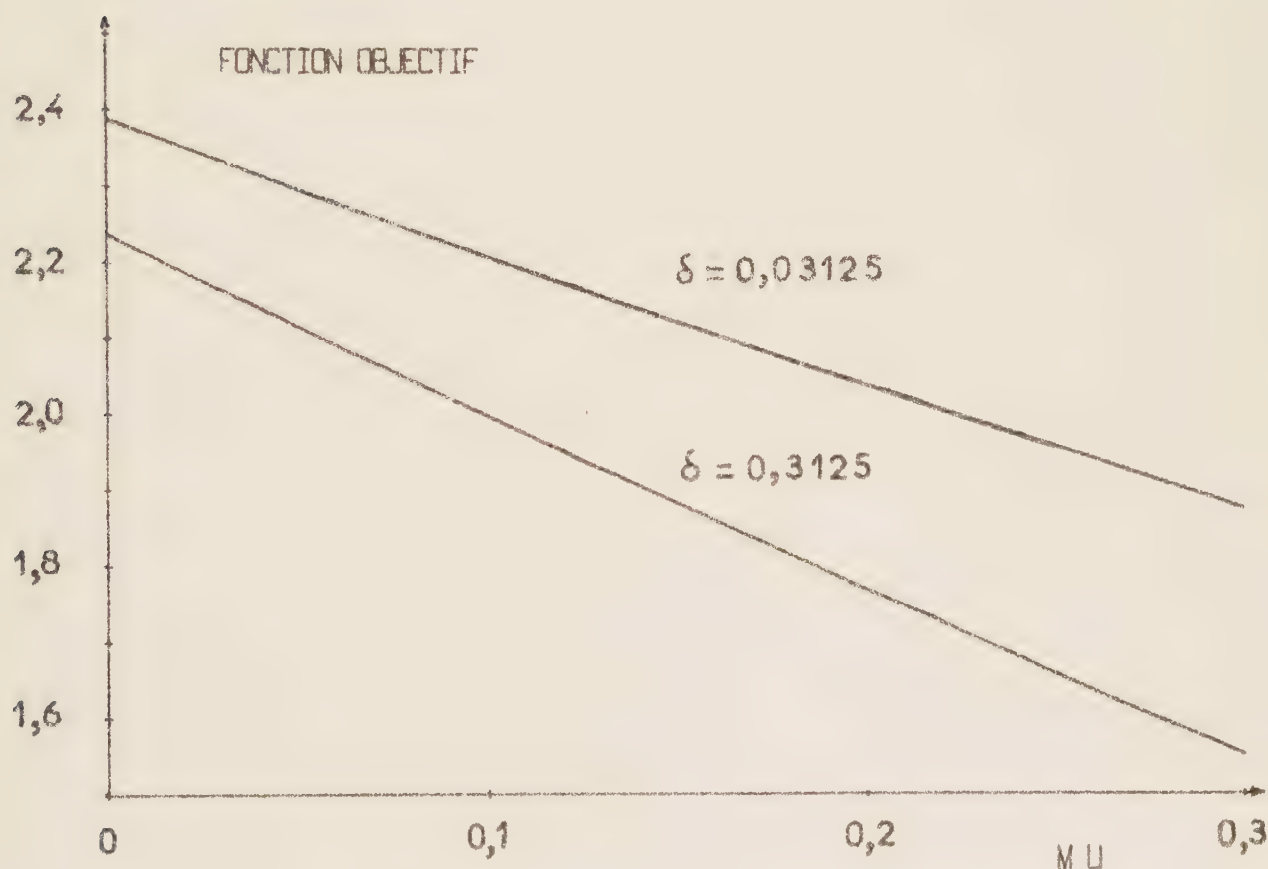


Fig. II.1.3 - Variations de la fonction objectif en fonction des variations de μ et δ

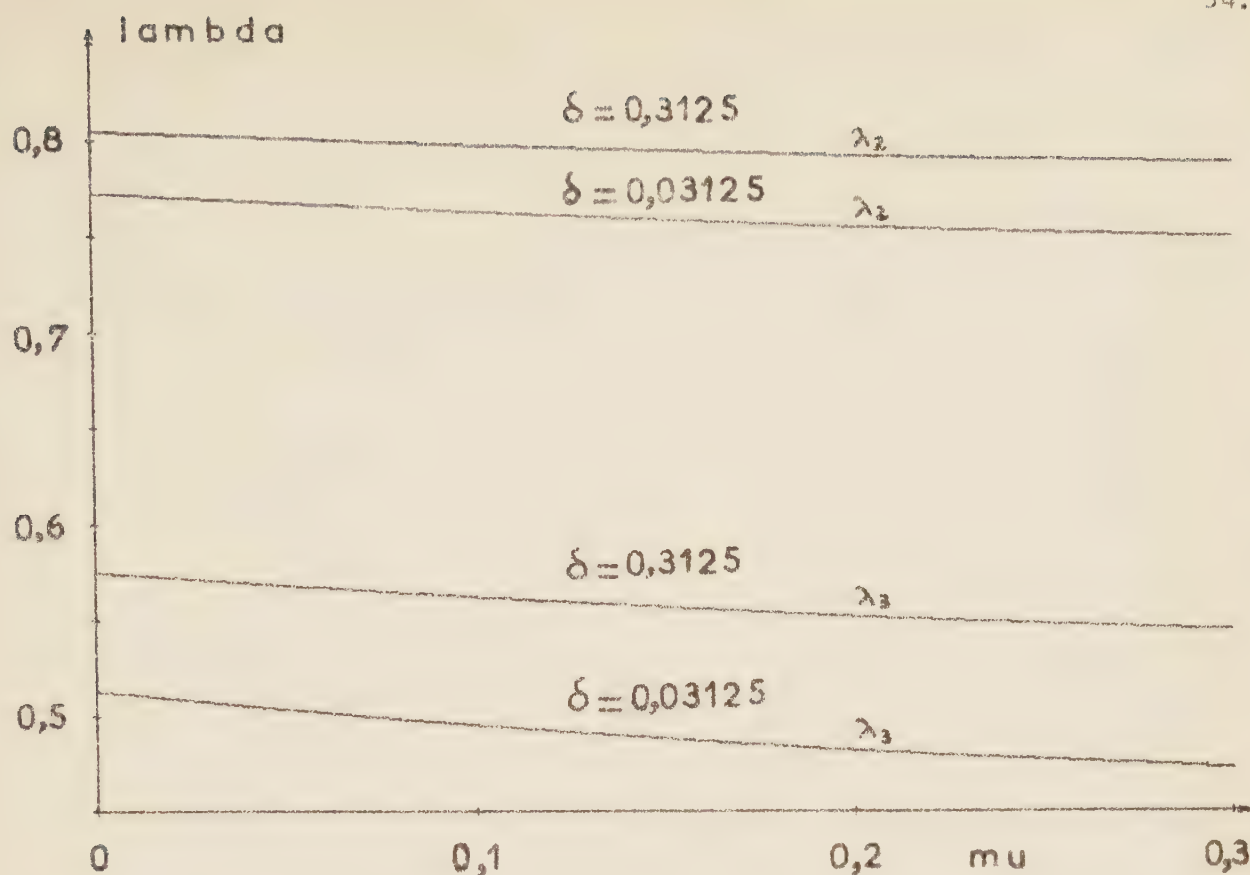


Fig. II.1.4 - Variations de λ_2 et λ_3 en fonction des variations de μ et δ

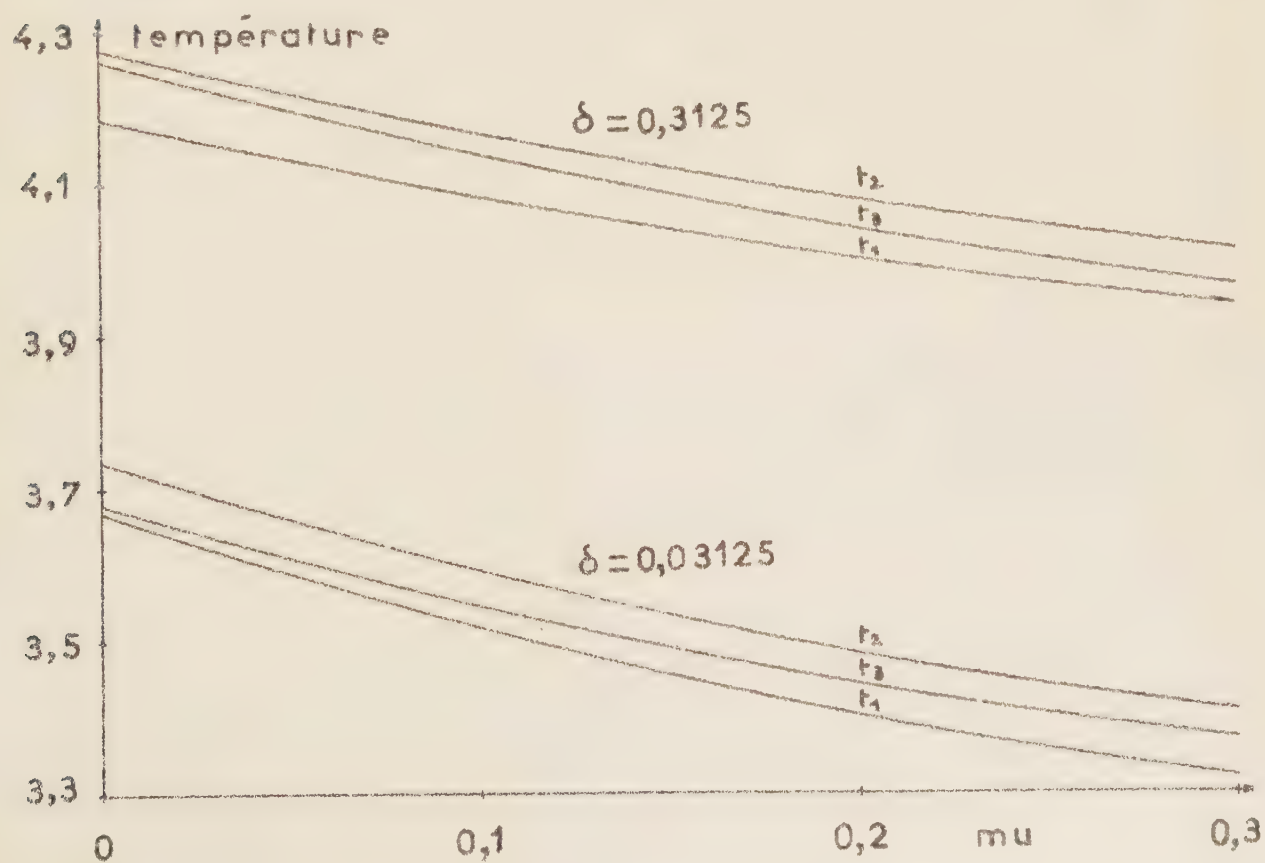


Fig. II.1.5 - Variations des températures d'entrées en fonction des variations de μ et δ

On peut remarquer que les variations de la fonction objectif pour une valeur donnée μ et pour de faibles variations autour de cette valeur peuvent être obtenues à partir du calcul de $\partial F_1 / \partial \mu$.

En effet $\partial F_1 / \partial \mu = - \lambda_N t_N$ soit donc $\Delta F_1 \approx - \lambda_N t_N \Delta \mu$.

On peut vérifier numériquement (tableau II.2) que pour μ passant de la valeur 0,14 à 0,16 on a un $\Delta F_1 = - 0,034$ et que pour $\mu = 0,15$ nous avons $\lambda_3 t_3 = 1,6849$ soit donc $- \lambda_3 t_3 \Delta \mu = - 0,034$.

μ	Fonction objectif	t_3	λ_2	λ_3	W_1/G	W_2/G	W_3/G
0,14	2,139	3,471	0,761	0,490	1,428	0,616	0,258
0,15	2,122	3,456	0,759	0,487	1,506	0,650	0,270
0,16	2,105	3,441	0,758	0,486	1,569	0,685	0,281

Tableau II.2

Variations de μ au voisinage de $\mu = 0,15$ avec $\delta = 0,03125$

De même pour de faibles variations de δ nous avons :

$$\frac{\partial F_1}{\partial \delta} = - \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{g_i}^{g'_i} \frac{dg}{R_i(g)} \quad \text{soit donc} \quad \Delta F_1 \approx - \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{g_i}^{g'_i} \frac{dg}{R_i(g)} \cdot \Delta \delta$$

Dans une très récente publication, HELLINCKX et VAN ROMPAY étudient, en appliquant le principe de PONTRYAGIN, la sensibilité du réacteur optimisé à une variation des paramètres économiques. Les données économiques et la forme de la fonction objectif qu'ils ont adoptées ne nous ont malheureusement pas permis de comparer leurs résultats aux nôtres.

II.1.1.5 - Variation du nombre de lits du réacteur

Notre méthode nous permet d'étudier facilement l'influence du nombre des lits du réacteur sur la valeur de la fonction objectif. Le temps de calcul n'est en effet jamais prohibitif même avec un petit ordinateur. Les résultats pour des réacteurs de un à huit lits sont rapportés dans les tableaux II.3 à II.10 et la figure II.1.7.

N° du lit	g	t	g'	t'	λ	R(g)	R(g')	W/G
1	0,000	2,918	2,218	5,137	1,000	0,079	0,031	3,670
Fonction objectif = 1,666								

Tableau II.3 - Réacteur à un lit

N° du lit	g	t	g'	t'	λ	R(g)	R(g')	W/G
1	1,313	3,289	2,419	4,395	1,000	0,201	0,031	1,945
2	0,000	3,203	2,129	5,332	0,617	0,251	0,201	0,791
Fonction objectif = 2,037							$\sum \frac{W}{G}$	2,736

Tableau II.4 - Réacteur à deux lits

N° du lit	g	t	g'	t'	λ	R(g)	R(g')	W/G
1	1,802	3,488	2,450	4,176	1,000	0,293	0,031	1,506
2	1,311	3,531	2,374	4,594	0,756	0,487	0,293	0,650
3	0,000	3,436	2,041	5,497	0,488	0,649	0,487	0,270
Fonction objectif = 2,422							$\sum \frac{W}{G}$	2,426

Tableau II.5 - Réacteur à trois lits

N° de lit	g	t	g'	t'	λ	R(g)	R(g')	W/G
1	2,013	3,582	2,459	4,028	1,000	0,326	0,031	1,303
2	1,798	3,678	2,412	4,292	0,834	0,568	0,327	0,610
3	1,302	3,738	2,329	4,764	0,644	0,992	0,572	0,294
4	0,000	3,669	1,962	5,631	0,428	1,367	0,992	0,122
Fonction objectif : 2,151							$\sum_{i=1}^4 \frac{W_i}{G} = 2,329$	

Tableau II.6 - Réacteur à quatre lits

N° de lit	g	t	g'	t'	λ	R(g)	R(g')	W/G
1	2,118	3,638	2,463	3,982	1,000	0,339	0,031	1,160
2	2,003	3,742	2,416	4,150	0,876	0,560	0,341	0,553
3	1,788	3,847	2,384	4,442	0,738	0,994	0,559	0,320
4	1,286	3,912	2,282	4,909	0,579	1,761	0,991	0,157
5	0,000	3,858	1,888	5,746	0,394	2,530	1,758	0,065
Fonction objectif : 2,164							$\sum_{i=1}^5 \frac{W_i}{G} = 2,255$	

Tableau II.7 - Réacteur à cinq lits

N° du lit	g	t	g'	t'	λ	R(g)	R(g')	W/G
1	2,179	3,672	2,464	3,957	1,000	0,342	0,031	1,072
2	2,112	3,765	2,413	4,067	0,903	0,520	0,341	0,503
3	1,997	3,873	2,396	4,272	0,796	0,861	0,520	0,329
4	1,773	3,984	2,355	4,567	0,675	1,543	0,859	0,193
5	1,268	4,059	2,237	5,028	0,535	2,788	1,534	0,096
6	0,000	4,016	1,824	5,840	0,372	4,192	2,778	0,040
Fonction objectif = 2,170						$\sum_i \frac{W_i}{G} = 2,233$		

Tableau II.8 - Réacteur à six lits

N° du lit	g	t	g'	t'	λ	R(g)	R(g')	W/G
1	2,215	3,689	2,465	3,940	1,000	0,336	0,031	1,009
2	2,170	3,773	2,409	4,013	0,919	0,482	0,335	0,459
3	2,101	3,873	2,398	4,170	0,832	0,742	0,482	0,326
4	1,981	3,985	2,376	4,380	0,736	1,236	0,740	0,215
5	1,751	4,103	2,325	4,677	0,627	2,238	1,232	0,127
6	1,244	4,188	2,191	5,134	0,501	4,128	2,240	0,063
7	0,000	4,168	1,761	5,929	0,354	6,626	4,128	0,025
Fonction objectif = 2,175						$\sum_i \frac{W_i}{G} = 2,224$		

Tableau II.9 - Réacteur à sept lits

N° du lit	g	t	g'	t'	λ	R(g)	R(g')	W/G
1	2,239	3,685	2,467	3,913	1,000	0,314	0,031	1,014
2	2,207	3,762	2,407	3,961	0,930	0,431	0,314	0,443
3	2,162	3,851	2,398	4,087	0,856	0,623	0,432	0,330
4	2,090	3,952	2,385	4,247	0,776	0,960	0,621	0,236
5	1,967	4,068	2,358	4,460	0,688	1,607	0,959	0,156
6	1,733	4,191	2,300	4,759	0,588	2,933	1,607	0,092
7	1,228	4,283	2,155	5,210	0,473	5,475	2,938	0,046
8	0,000	4,273	1,717	5,990	0,338	9,01	5,465	0,019

Fonction objectif = 2,177

$$\sum_i \frac{w_i}{G} = 2,336$$

Tableau 11.10 - Réacteur à huit lits

On peut remarquer que la valeur de la fonction objectif tend vers une valeur limite lorsque le nombre de lits augmente. On pourrait penser que cette valeur correspond à celle d'un réacteur obéissant à la progression optimale de température (P.O.T.). En fait, il n'en est rien, car si ce réacteur est celui qui demande le minimum de catalyseur, il n'est pas celui qui rend optimum la fonction objectif que nous avons adoptée.

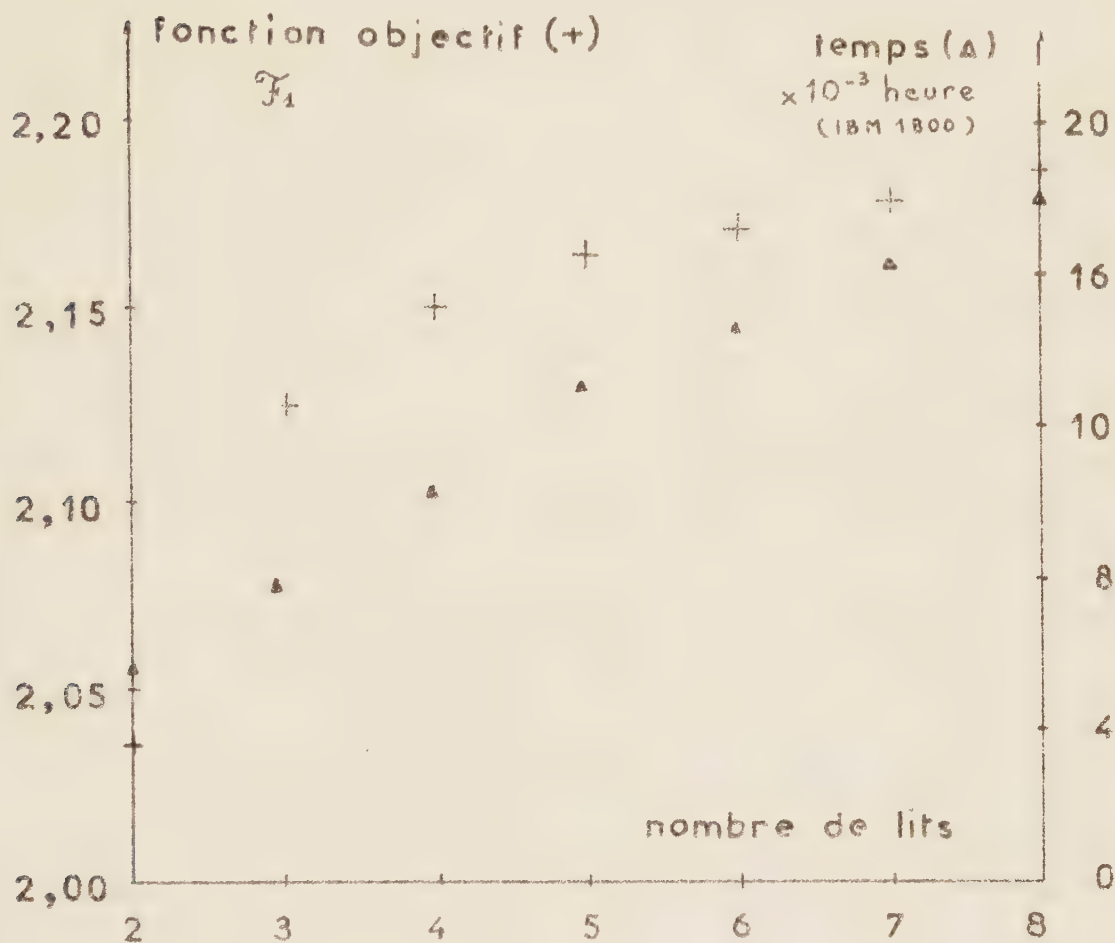


Figure II.1.7 - Variations de la valeur de la fonction objectif et du temps de calcul en fonction du nombre de lits du réacteur.

Nous avons étudié un réacteur dont le fonctionnement serait décrit dans le plan (g, t) par un segment AB et un segment BC, ce dernier se confondant avec la P.O.T. (figure II.1.6).

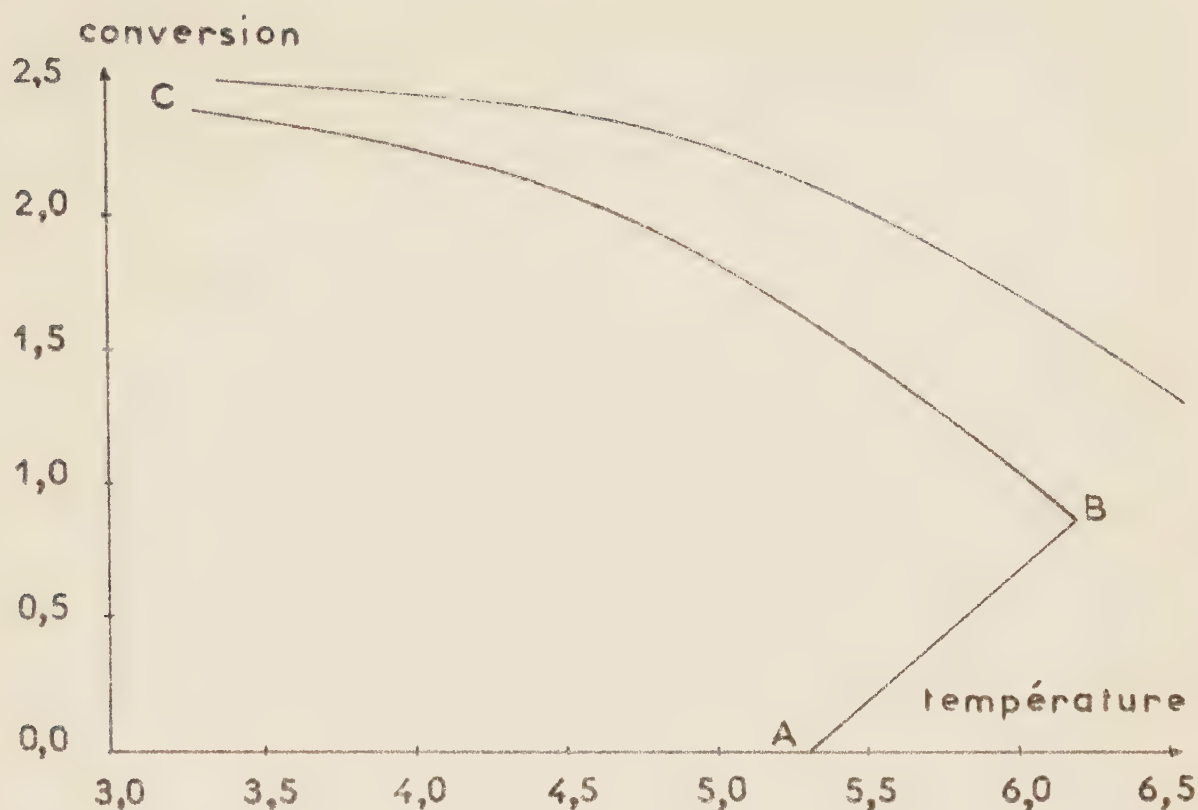


Figure II.1.6 - Schéma du fonctionnement du réacteur suivant partiellement la P.O.T.

Pour $g_1^i = 2,450$ (valeur de la conversion obtenue avec le réacteur à trois lits) nous avons trouvé $t_3 = 3,181$ pour la valeur optimum de la fonction objectif égale à 1,917. Cette valeur est inférieure à la valeur de la fonction objectif du réacteur à trois lits (2,122) car on doit préchauffer le débit total du mélange traversant le réacteur et non pas seulement la fraction λ_3 .

Avec $\mu = 0$ c'est-à-dire en ne faisant pas intervenir le coût du préchauffage pour $t \geq 5,3$ la valeur de la fonction est de 2,435, le poids de catalyseur étant de 3733 kg.

Pour $\mu = 0$ le réacteur à trois lits nous donnait $t = 3,67$ (2,388 pour la valeur de la fonction objectif) et un poids de catalyseur de 11 600 kg, et l'on voit ainsi que c'est dans ce cas seulement qu'un réacteur fonctionnant suivant la P.O.T. peut être intéressant du point de vue économique.

La figure II.1.7 nous permet également de remarquer que le temps de calcul en fonction du nombre de lits croît sensiblement linéairement. C'est un avantage très important de notre méthode par rapport à toutes celles qui avaient été proposées auparavant et avec lesquelles on pouvait difficilement envisager d'optimiser un réacteur ayant plus de trois à quatre lits.

II.1.2 - Analyse post-optimale

Nous avons déterminé les valeurs des variables permettant de réaliser le réacteur ayant le rendement optimum. Il est essentiel de pouvoir prévoir le comportement de ce réacteur sous l'effet de perturbations qui peuvent affecter les valeurs que nous avons attribuées aux différentes variables. Pour réaliser cette étude nous avons simulé sur ordinateur le fonctionnement du réacteur. C'est-à-dire que, étant donné les valeurs optimales des variables "naturelles" (W_i , λ_i pour $i = 1$ à N et t_N), nous les affectons, les unes après les autres de variations plus ou moins importantes ; nous calculons ensuite les valeurs correspondantes des variables qui peuvent être affectées secondairement par ces variations et nous en déduisons la valeur de la fonction objectif (organigramme, fig. II.1.8). Les résultats obtenus dans le cas d'un réacteur à trois lits sont donnés dans le tableau II.11 et la figure II.1.9.

On constate l'extrême sensibilité du réacteur (extinction) à une diminution, même faible de la température du mélange entrant dans le premier lit. Ce fait, qui n'avait jamais été signalé, montre le danger d'une utilisation brutale des résultats de l'optimisation : une diminution de 3°C fait enregistrer une perte d'environ 60 % sur la valeur de la fonction objectif. Le réacteur peut alors être considéré comme éteint. Il est évident qu'industriellement on ne saurait s'affranchir d'aussi minimes perturbations. Si nous augmentons au contraire la température t_N , la valeur de la fonction objectif n'est que très peu affectée. Il est donc préférable de choisir une valeur de fonctionnement de t_N légèrement supérieure à la valeur optimum. Nous pouvons également placer un excédent de catalyseur dans le premier lit afin de rendre le réacteur plus stable.

En conclusion, nous devons retenir de cette analyse post-optimale que l'optimisation nous conduit à un réacteur peut-être intéressant d'un point de vue économique, mais dont la sensibilité rendrait l'exploitation impossible. Cette analyse nous suggère un réacteur quasi-optimal dont la conduite serait beaucoup plus facile, tout en n'ayant une fonction économique que très légèrement inférieure.

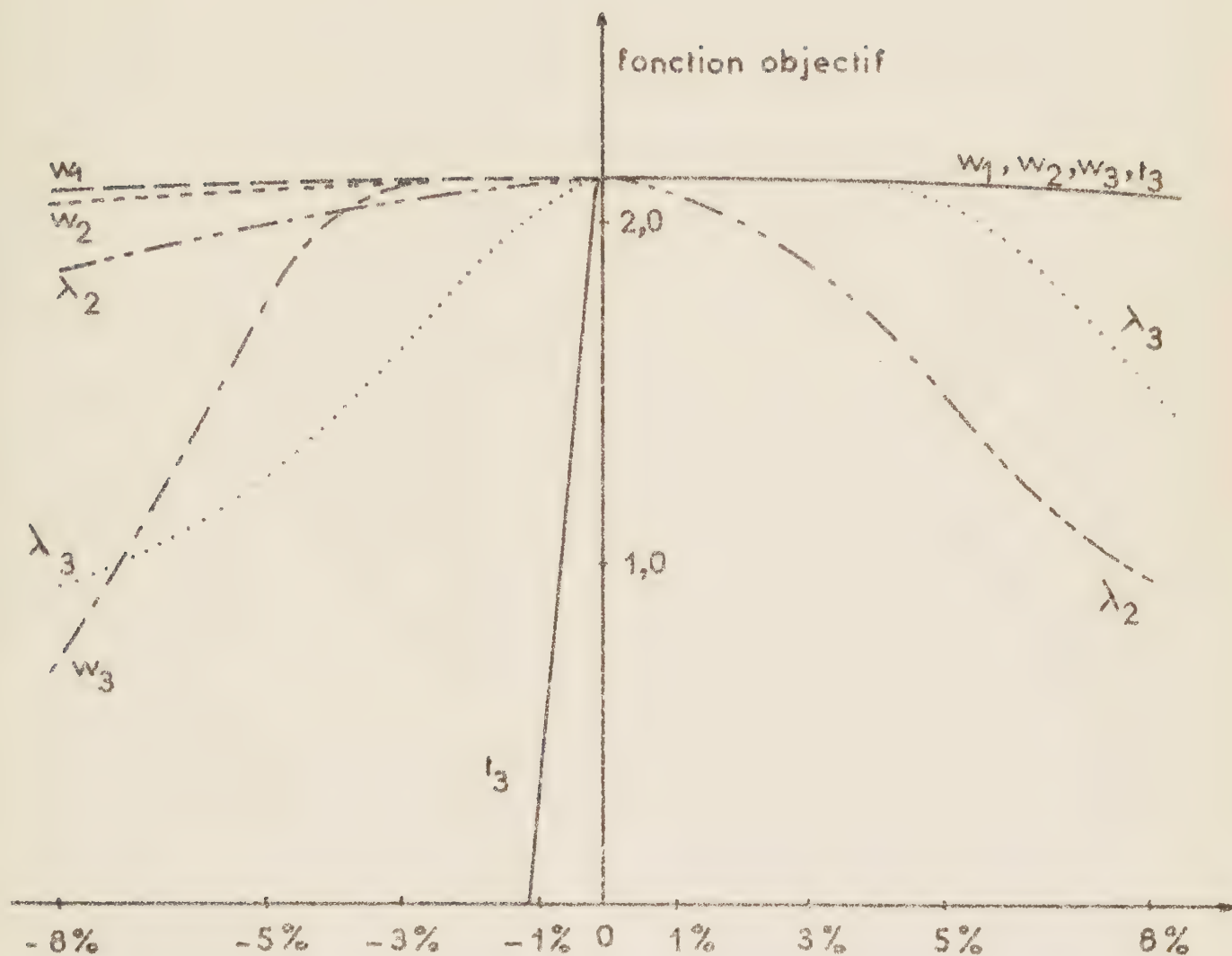


Figure II.1.9 - Variations de la fonction objectif sous l'influence des variations des variables de décision "naturelles".

	- 15 %	- 10 %	- 8 %	- 5 %	- 3 %	- 1 %	+ 1 %	+ 3 %	+ 5 %	+ 8 %	+ 10 %	+ 15 %
T_3	-0,265	-0,244	-0,224	-0,164	-0,071	0,275	2,119	2,111	2,103	2,090	2,080	2,058
λ_2	1,404	1,630	1,814	2,016	2,097	2,120	2,096	1,343	1,076	0,914	0,858	0,782
λ_3	0,617	0,729	0,800	0,985	1,263	2,060	2,119	2,111	2,102	1,520	0,839	0,552
W_1/c	2,099	2,114	2,118	2,121	2,121	2,122	2,122	2,121	2,121	2,120	2,119	2,117
W_2/c	1,893	2,088	2,111	2,120	2,121	2,122	2,122	2,121	2,121	2,121	2,120	2,120
W_3/c	0,140	0,323	0,470	1,110	2,120	2,122	2,122	2,121	2,121	2,121	2,121	2,120

Tableau II.11 - Valeurs de la fonction objectif en fonction des variations des variables de décision

"paramètres",

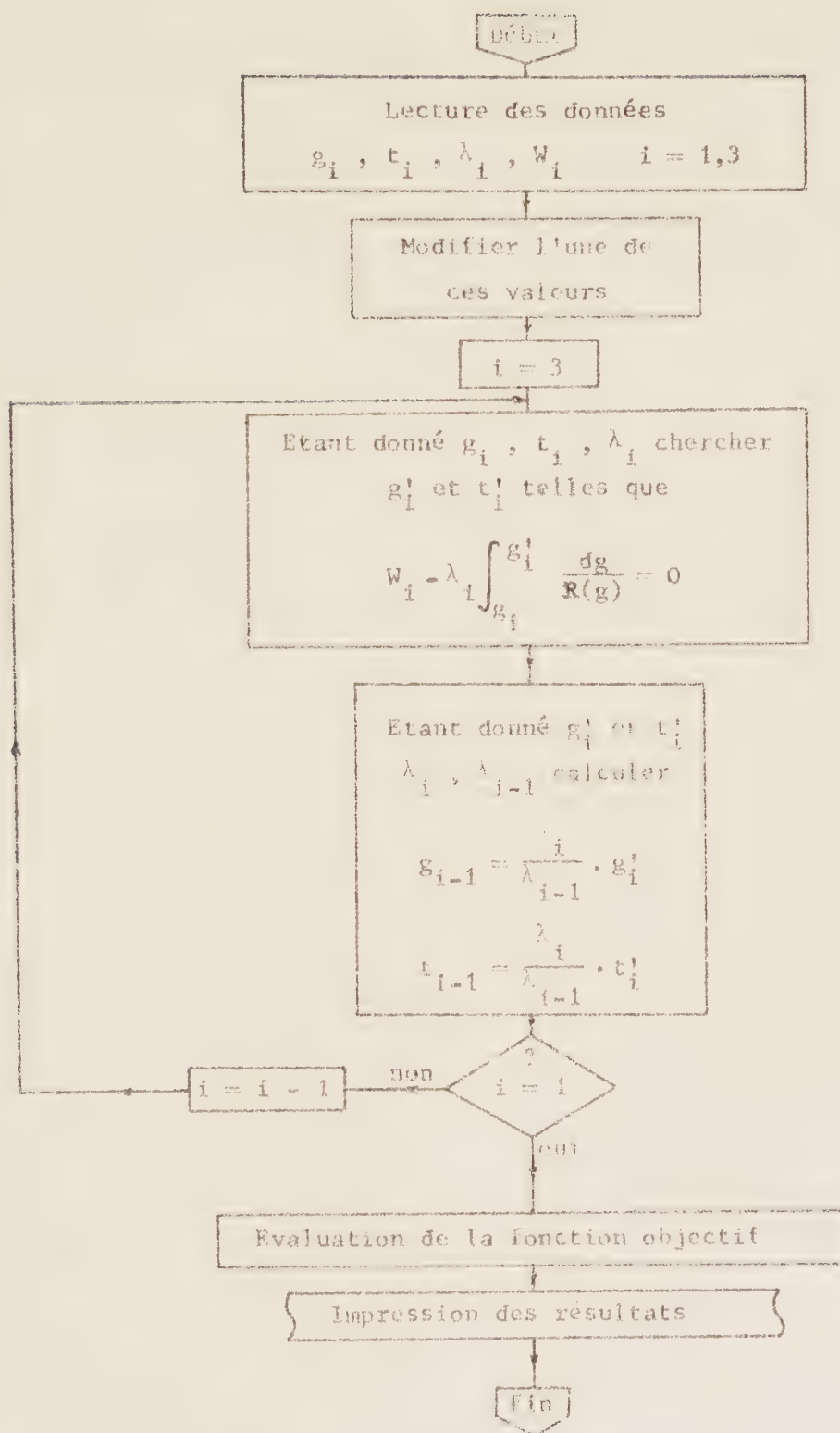


Figure II.1.8 - Organigramme du programme de simulation du réacteur optimal soumis à des perturbations.

II.1.3 - Optimisation en présence de contraintes

Nous avons signalé que des contraintes pouvaient être imposées lors de l'établissement du projet. Nous considérons en premier la contrainte qui résulte d'un taux de conversion fixé à la sortie du réacteur. Cette contrainte peut être imposée par la qualité du produit que l'on veut obtenir ou par certains éléments suivants d'une chaîne de production dont notre réacteur peut n'être qu'un maillon.

II.1.3.1 - Conversion de sortie fixée

La conversion de sortie g_1^1 étant fixée, il reste $2N-1$ variables de décision : t_N , z , λ_j pour j variant de 2 à $N-1$ et g_j^1 pour j variant de 2 à N . Le calcul des dérivées du § II.1.1.1 reste valable sauf évidemment en ce qui concerne la dérivée par rapport à g_1^1 . La relation (II.1.6) n'existe donc plus. Mais on peut facilement adapter notre algorithme (organigramme, fig. II.1.9) à ce cas particulier. En effet, lorsque g_1 et t_1 sont calculés nous pouvons trouver t_1^1 connaissant g_1^1 car :

$$t_1^1 = t_1 + g_1^1 - z_1$$

Le réacteur est alors entièrement déterminé.

Quelques résultats obtenus en imposant différentes valeurs à g_1^1 sont donnés dans le tableau II.12.

g_1^1	t_3	λ_2	λ_3	w_1/G	w_2/G	w_3/G	fonction objectif
2,485	2,811	0,714	0,409	11,683	5,404	2,279	1,707
2,480	2,959	0,726	0,428	10,973	5,189	1,342	1,912
2,460	3,335	0,753	0,467	9,141	4,913	0,389	2,115
2,450	3,476	0,759	0,488	8,804	4,630	0,273	2,122
2,400	3,557	0,766	0,501	8,916	4,479	0,201	2,083

Tableau II.12 - Réacteur à trois lits conversion de sortie imposée.

Pour $g_1^1 = 2,470$ nous donnons les résultats obtenus en faisant varier le nombre de lits du réacteur. Comme nous pouvons nous y

attendre si l'on désire un taux de conversion élevé sans trop affecter la fonction objectif, il est préférable d'augmenter le nombre des lits (cf. Tableau II.9).

Nombre de lits	Fonction objectif	$\sum_1^N W_i / G$	t_N
3	2,086	5,194	3,229
4	2,141	3,547	3,517
5	2,159	3,122	3,762
6	2,168	2,830	3,944
7	2,172	2,740	4,072

Tableau II.13 - $g_1^1 = 2,470$ nombre de lits variable

II.1.3.2 - Contrainte sur les températures de sortie des lits

Supposons que les propriétés physicochimiques du catalyseur nous interdisent de dépasser une certaine température $t_{\max}$. La réaction étant exothermique, les températures à la sortie des lits peuvent atteindre et même dépasser cette température. Nous devons donc étudier le cas où une ou plusieurs de ces températures dépassent $t_{\max}$.

Cette contrainte peut s'exprimer par l'inégalité :

$$t_i^1 \leq t_{\max} \quad \text{pour } i \text{ variant de } 1 \text{ à } N$$

$$\text{soit } t_i^1 - t_{\max} \leq 0 \quad \text{pour } i \text{ variant de } 1 \text{ à } N$$

Nous appliquons la méthode (voir par exemple [25]) de KUHN et TUCKER et introduisons le paramètre y_i^2 afin de pouvoir transformer la contrainte "inégalité" en contrainte "égalité". En effet :

$$t_i^1 - t_{\max} \leq 0 \quad \text{est équivalent à} \quad t_i^1 - t_{\max} + y_i^2 = 0$$

Prenons alors comme nouvelle fonction objectif la fonction de Lagrange φ qui s'écrit :

$$\varphi = \mathcal{F}_1 + l_N(t_N + g_N^1 - t_{\max} + y_N^2) + \sum_{i=1}^{N-1} l_i(g_i^1 + \frac{z}{\lambda_i} - t_{\max} + y_i^2) \quad (II.1.10)$$

où les l_i sont les multiplicateurs de Lagrange.

$\mathcal{F}_1$ est la fonction définie au § II.1.1 et nous conservons les mêmes variables de décision.

Les dérivées partielles par rapport à ces variables de décision et par rapport aux l_i et y_i doivent nécessairement s'annuler à l'optimum.

Nous obtenons ainsi les relations :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t_N} = \frac{g'_N}{R_{N-1}(g_{N-1})} + \int_0^{g'_N} \frac{1}{R_N(g)} - L_N \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{R(g,t)} \right) dg + \frac{1}{R_N} \right] = 0 \quad (\text{II.1.11})$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t_N} = t_N + g'_N - t_{N+1} + y_N^2 = 0 \quad (\text{II.1.12})$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial l_i} = \frac{1}{R_{i-1}(g_{i-1})} - \frac{1}{R_i(g'_i)} - \frac{1}{\partial l_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (\text{II.1.13})$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda_i} = \frac{g_i}{R_i(g_i)} - \frac{g'_i}{R_{i-1}(g'_{i-1})} + \int_{g_i}^{g'_i} \left[\frac{1}{R_i(g)} + \lambda_i \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \left(\frac{1}{R_i(g)} \right) \right] dg + \frac{1}{\lambda_i^2} = 0$$

en tenant compte de la relation (II.1.13) :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda_i} = \frac{g_i}{R_i(g_i)} - \frac{g'_i}{R_i(g'_i)} + \int_{g_i}^{g'_i} \left[\frac{1}{R_i(g)} + \lambda_i \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \left(\frac{1}{R_i(g)} \right) \right] dg + \frac{1}{\lambda_i^2} + \frac{1}{\delta \lambda_i} \frac{g'_i}{\delta \lambda_i} = 0$$

or $\frac{z}{\lambda_i} = t_i - g_i$ donc :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda_i} = \frac{g_i}{R_i(g_i)} - \frac{g'_i}{R_i(g'_i)} + \int_{g_i}^{g'_i} \left[\frac{1}{R_i(g)} + \lambda_i \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \left(\frac{1}{R_i(g)} \right) \right] dg + \frac{1}{\lambda_i^2} (t_i - g_i + g'_i) = 0$$

soit finalement :

$$\frac{d\mathcal{L}}{d\lambda_1} = \frac{R_1}{R_1(t_1)} + \frac{g_1^2}{R_1(t_1)} + \int_{R_1}^{t_1} \left[\frac{1}{R_1(t)} + \frac{1}{\delta\lambda_1} \left(\frac{1}{R_1(t)} \right) \right] dt + \frac{1}{\delta\lambda_1} t_1^2 = 0 \quad (11.1.14)$$

$$\frac{d\mathcal{L}}{d\lambda_1} = R_1^2 + \frac{Z}{\lambda_1} + t_{\max}^2 + g_1^2 - t_1^2 - t_{\max}^2 + y_1^2 = 0 \quad (11.1.15)$$

$$\frac{d\mathcal{L}}{d\lambda_1} = 2 \frac{1}{\lambda_1} = 0 \quad (11.1.16)$$

Cette dernière relation sera vérifiée si $\lambda_1 = 0$ ou si $y_1 = 0$ ou si $g_1^2 - t_1^2 = 0$.

$\lambda_1 = 0$ correspond au cas sans contrainte et nous retrouvons les formules du § 11.1.1.

$y_1 = 0$ correspond au cas où $t_1^* = t_{\max}$, t_1^* et g_1^* sont alors déterminés.

$g_1^2 - t_1^2 = 0$ correspond au cas où la contrainte est justement la valeur optimale de t_1^* .

En conséquence, si la valeur de la contrainte n'est pas dépassée, l'algorithme que nous avons précédemment établi reste valable. Si la valeur de la contrainte est dépassée, les t_1^* et g_1^* sont déterminés par l'intersection de l'adiabatique avec les droites $t = t_{\max}$. On peut alors calculer $\lambda_1/\delta\lambda_1$ à partir de la relation (11.1.14) et reporter sa valeur dans (11.1.13) pour calculer $R(g_{i-1}, t_{i-1})$ qui permet le calcul de g_{i-1}, t_{i-1} . Les modifications à apporter au programme ORSP sont donc minimes (organigramme - Fig. 11.1.10) et l'augmentation du temps de calcul faible. Le tableau 11.14 donne les résultats obtenus pour un réacteur à trois lits avec différentes contraintes.

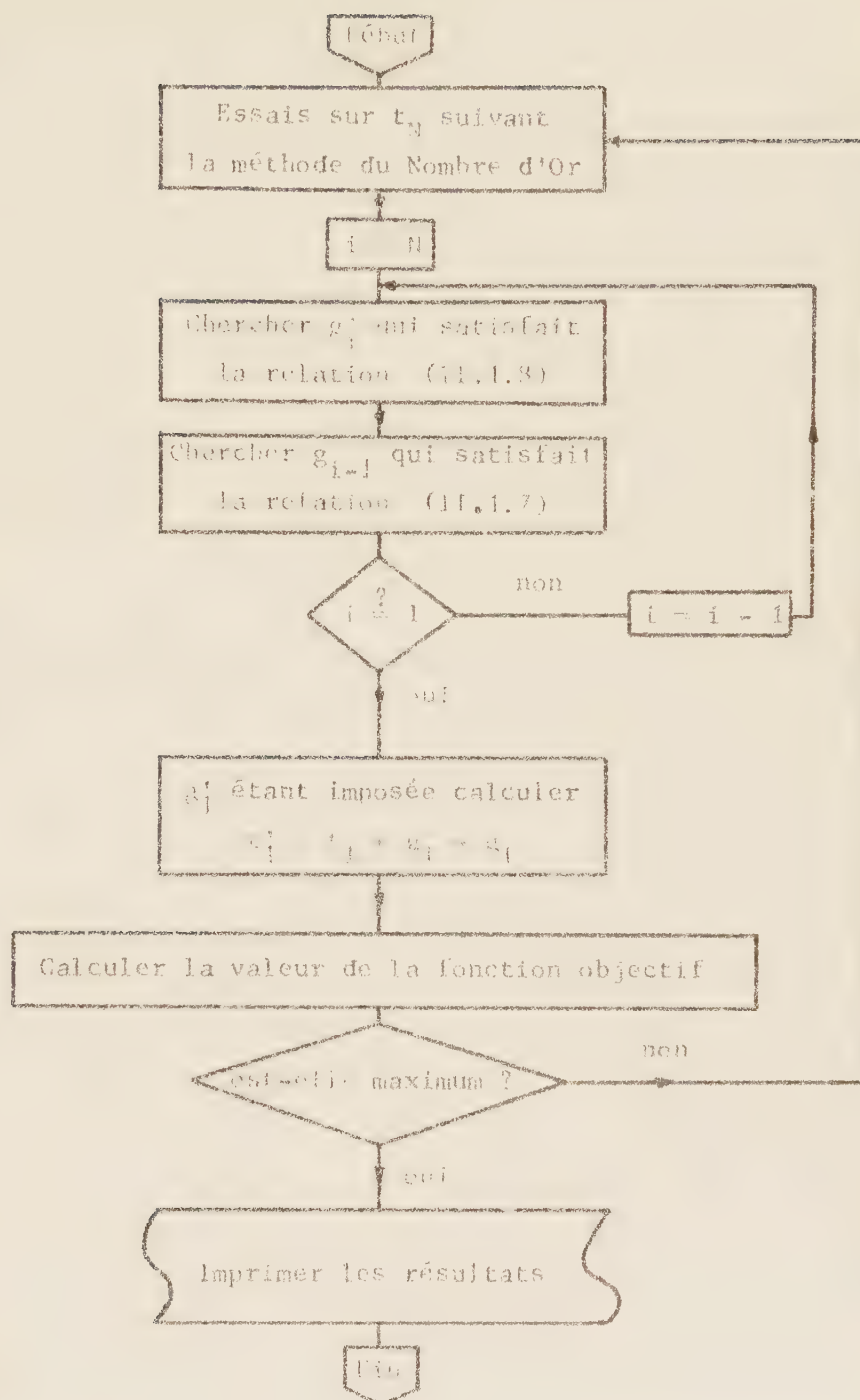


Figure II.1.10 - Optimisation avec conversion de sortie fixée

Lit	ρ	t	ρ'	t'	α	$R(\rho)$	$R(t')$
1	1,620	3,490	2,452	4,120	1,0	0,291	0,03125
2	1,362	3,542	2,380	4,561	0,765	0,442	0,293
3	0,0	3,324	2,076	5,400	0,503	0,502	2,720
Fonction objectif : 2,121 contrainte de température : 5,4 $\approx$ 557°C							

Lit	ρ	t	ρ'	t'	α	$R(\rho)$	$R(t')$
1	1,675	3,617	2,455	4,187	1,0	0,253	0,03126
2	0,991	3,235	2,206	4,5	0,755	0,234	2,922
3	0,0	3,142	1,358	4,5	0,554	0,198	9,083
Fonction objectif : 2,059 contrainte de température : 4,5 $\approx$ 471°C							

Tableau 11.16 - Optimisation avec contraintes

II.2 - Réacteur à refroidissement par échangeur

II.2.1 - Développement analytique

Nous avons vu au chapitre 1 que dans ce cas de refroidissement la fonction objectif s'écrivait :

$$F_2 = g_1' = \delta \sum_{i=1}^N \int_{g_i}^{g_i'} \frac{dg}{R_i(t)} + \mu (t_N - \sum_{i=1}^{N+1} \mu^i (t_{i+1}' - t_i')) \quad (II.2.1)$$

La conversion reste constante au cours du refroidissement. Nous avons donc :

$$g_i' = g_j$$

la relation $t = g + t_i - g_i$ reste valable à l'intérieur du lit i .

Nous choisissons les g_i' et t_i comme variables de décision et posons $g_{N+1}' = 0$. Notre fonction objectif s'écrit alors :

$$F_2 = g_1' = \delta \sum_{i=1}^N \int_{g_{i+1}'}^{g_i'} \frac{dg}{R(g, t_i - g_{i+1}')} + \mu (t_N - \mu^i (t_N + g_2' - t_1')) \quad (II.2.2)$$

Une condition nécessaire d'optimalité est que les dérivées partielles par rapport aux variables de décision de la fonction objectif s'annulent à l'optimum.

$$\frac{\partial F_2}{\partial g_1'} = 1 - \frac{1}{R(g_1', t_1')} = 0 \quad \text{d'où} \quad R(g_1', t_1') = 0 \quad (II.2.3)$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial g_2'} = \frac{1}{R(g_1', t_1')} - \frac{1}{R(g_2', t_2')} - \int_{g_2'}^{g_1'} \frac{\partial}{\partial g_2'} \left(\frac{1}{R(g, t)} \right) dg + \frac{\mu^i}{\delta} = 0 \quad (II.2.4)$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial g_i^1} = \frac{1}{\mathcal{R}(g_{i-1}, t_{i-1})} - \frac{1}{\mathcal{R}(g_i^1, t_i^1)} - \int_{g_i^1}^{g_{i+1}^1} \frac{\partial}{\partial g_i^1} \left(\frac{1}{\mathcal{R}(g, t)} \right) dg = 0 \quad i = 3 \text{ à } N \quad (11.2.5)$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial t_1} = - \delta \int_{g_2^1}^{g_1^1} \frac{\partial}{\partial t_1} \left(\frac{1}{\mathcal{R}_1(g)} \right) dg + \mu - \mu' = 0 \quad (11.2.6)$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial t_i} = - \delta \int_{g_{i+1}^1}^{g_i^1} \frac{\partial}{\partial t_i} \left(\frac{1}{\mathcal{R}_i(g)} \right) dg = 0 \quad i = 2, N-1 \quad (11.2.7)$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial t_N} = - \delta \int_0^{g_N^1} \frac{\partial}{\partial t_N} \left(\frac{1}{\mathcal{R}_N(g)} \right) dg + \mu - \mu' = 0 \quad (11.2.8)$$

Nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial}{\partial g_i^1} \left(\frac{1}{\mathcal{R}} \right) = \frac{\partial}{\partial t_i} \left(\frac{1}{\mathcal{R}} \right) \frac{\partial t_i}{\partial g_i^1} \quad (11.2.9)$$

comme $t_i = t_i^1 - g_i^1 + g_i$ on obtient : $\frac{\partial}{\partial g_i^1} \left(\frac{1}{\mathcal{R}} \right) = - \frac{\partial}{\partial t_i} \left(\frac{1}{\mathcal{R}} \right)$ d'où les relations :

$$\mathcal{R}(g_i^1, t_i^1) = \delta \quad (11.2.10)$$

$$\mathcal{R}(g_{i-1}, t_{i-1}) = \mathcal{R}(g_i^1, t_i^1) \quad i = 2, N-1 \quad (11.2.11)$$

$$\int_{g_{i+1}^1}^{g_i^1} \frac{\partial}{\partial t_i} \left(\frac{1}{\mathcal{R}_i(g)} \right) dg = 0 \quad i = 2, N-1 \quad (11.2.12)$$

$$\int_0^{g_N^1} \frac{\partial}{\partial t_N} \left(\frac{1}{\mathcal{R}_N(g)} \right) dg + \frac{\mu - \mu'}{\delta} = 0 \quad (11.2.13)$$

Ces relations avaient déjà été publiées par d'autres auteurs : HORN et KUCHLER [6] dans le cas où $\mu = \mu' = 0$; ARIS [7] dans le cas où

$\mu \neq 0$ et $\mu' = 0$ et plus récemment par BADGUERAHANIAN [26].

II.2.2 - Programmation. Résultats

Ces relations nous permettent de construire un algorithme d'optimisation identique, à quelques simplifications près, à celui présenté au § II.1. L'étude du réacteur à refroidissement par échangeurs se présente donc comme un cas particulier plus simple de l'étude du réacteur à refroidissement par injection de réactifs frais.

* Résultats

N° du lit	μ	μ'	μ''	μ'''	W/C
1	2,339	3,790	2,407	3,898	0,659
2	1,776	4,063	2,156	4,667	0,256
3	0,000	6,141	1,776	5,916	0,078
Fonction objectif = 2,507					
Temps de calcul (1800 IBM) $\approx$ 5 mn.					

Tableau II.15 - Réacteur à refroidissement par échangeurs

$$\mu = \mu' = 0 \quad \mu'' = 0,03175$$

On peut comparer ces résultats avec ceux obtenus dans le cas où le refroidissement est assuré par l'injection de réactifs frais et lorsque $\mu = 0$. Dans ce cas, on constate que le réacteur à refroidissement par échangeurs permet d'obtenir un taux de conversion plus élevé pour une quantité plus faible de catalyseur.

N° du lit	g	t	g'	t'	W/C
1	1,800	1,687	2,430	4,317	0,647
2	1,300	3,744	2,423	4,758	0,345
3	0,000	3,672	1,951	5,033	0,155
Fonction objectif = 2,388					

Tableau II.16 - Réacteur à trois lits $\mu = 0$ $\delta = 0,03125$

Refroidissement par injection de réactifs frais

Le tableau II.17 donne également les résultats obtenus en supposant que le prix de revient du refroidissement est le même que celui du préchauffage (avec notre convention de signe $\mu = \mu' = 0,150$).

N° du lit	g	t	g'	t'	W/C
1	2,446	3,335	2,460	3,349	0,406
2	1,957	3,684	2,746	4,172	0,930
3	0,000	3,685	1,957	5,642	0,275
Fonction objectif = 1,437					

Tableau II.17 - Refroidissement par échangeurs $\mu = \mu' = 0,150$

II.2.3 - Contraintes sur la conversion de sortie ou sur les températures de sortie des lits

L'étude théorique de l'optimisation du réacteur à refroidissement intermédiaire par échangeurs en présence de ces contraintes est identique à l'étude effectuée pour le réacteur à refroidissement par injection de réactifs frais. Nous ne l'exposons donc pas et nous ne donnons

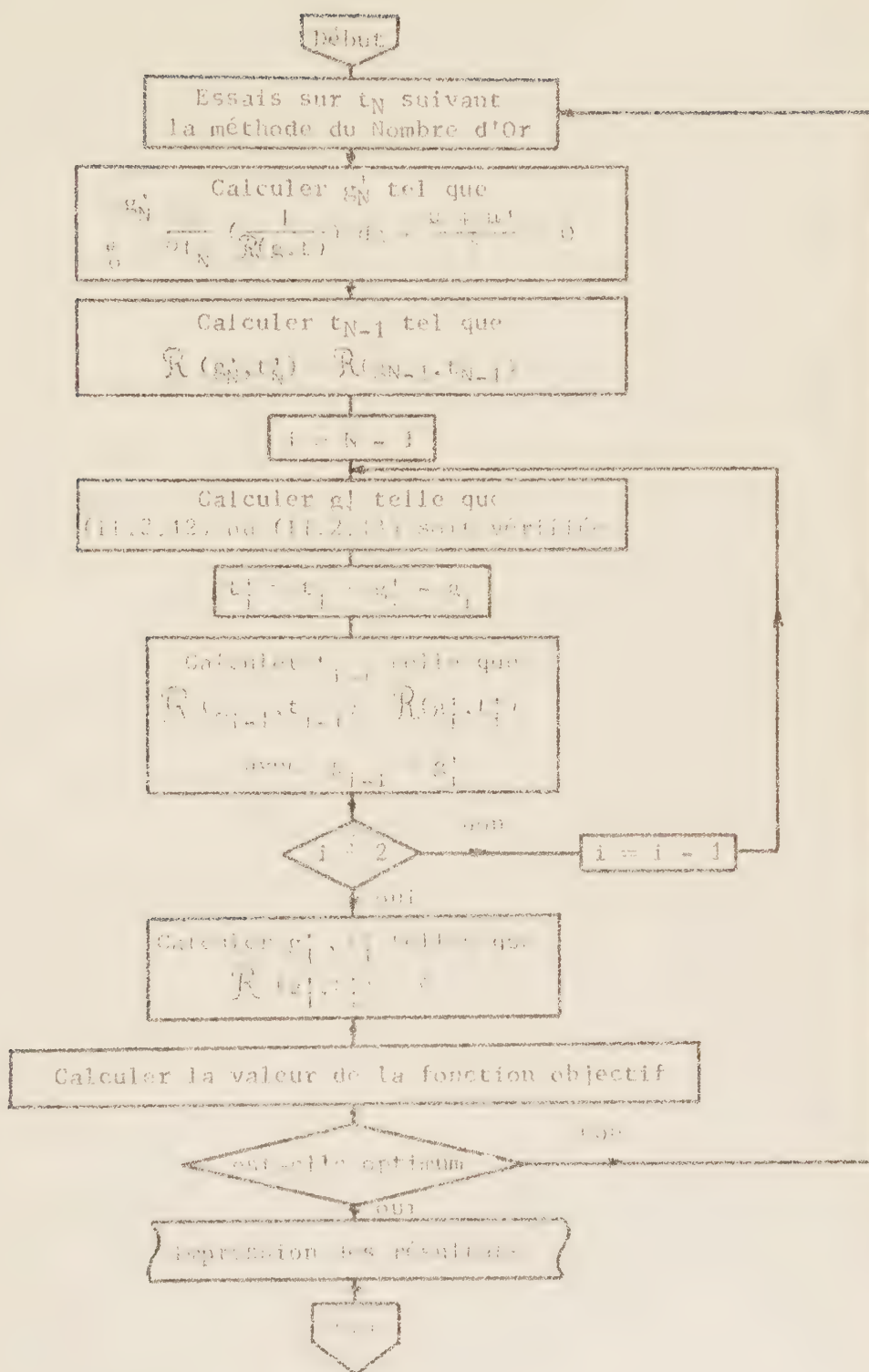


Figure II.2.1 - Organigramme du programme d'optimisation du réacteur à refroidissement par échangeurs.

que quelques résultats numériques se rapportant à l'optimisation du réacteur lorsque la conversion de sortie est fixée (Tableaux II.18 et II.19).

N° du lit	$\bar{g}$	$\bar{t}$	$\bar{g}'$	$\bar{t}'$	$R(\bar{g})$	$R(\bar{g}')$	W/G
1	2,451	3,302	2,462	3,313	0,03	0,02	0,587
2	2,001	3,673	2,451	4,124	0,451	0,03	1,001
3	0,000	3,568	2,001	5,589	0,967	0,451	0,390
Fonction objectif = 1,464							

Tableau II.18 - Réacteur à refroidissement intermédiaire avec

$$\bar{g}_1' \text{ fixé } \delta = 0,03125 \text{ et } \mu = \bar{g}_1' = 0,150$$

Les résultats du tableau II.19 permettent de comparer les deux systèmes de refroidissement que nous avons étudiés dans le cas où $\mu = \bar{g}_1' = 0$.

N° du lit	$\bar{g}$	$\bar{t}$	$\bar{g}'$	$\bar{t}'$	$R(\bar{g})$	$R(\bar{g}')$	W/G
1	2,265	4,046	2,430	4,251	0,947	0,164	0,237
2	1,646	4,353	2,265	4,071	4,944	0,947	0,113
3	0,000	4,447	1,646	6,097	14,038	4,943	0,037
Fonction objectif = 2,417							

Tableau II.19 - Réacteur à refroidissement par échangeurs avec $\bar{g}_1'$ fixé à la valeur obtenue avec le réacteur à refroidissement par injection de réactifs frais avec également $\mu = 0$ et $\delta = 0,03125$ (Tableau II.16).

Conclusion

Nous avons présenté une méthode rapide et exacte permettant d'optimiser un réacteur lors de l'établissement du projet. Nous avons fait remarquer que cette optimisation très poussée présentait l'inconvénient de donner un réacteur sensible aux variations de certaines variables de décision. Cette mise en évidence permettra à l'Ingénieur de projets de modifier en conséquence les valeurs numériques fournies par l'optimisation et d'obtenir ainsi le réacteur "idéal".

Après avoir étudié l'optimisation au niveau du projet, nous nous intéressons dans ce qui suit à l'optimisation du réacteur au cours de son fonctionnement.

PLAN DU CHAPITRE

Introduction

III.1 - Exposé du problème - Méthode de résolution proposée

III.1.1 - Calcul des dérivées de la fonction objectif modifiée

III.1.2 - Exploitation des relations obtenues

III.1.3 - Temps de calcul - Précision

III.2 - Résultats

III.2.1 - Vieillissement du catalyseur

III.2.1.a - Simulation des effets

III.2.1.b - Détermination des réglages

III.2.2 - Variations de la composition du mélange à l'entrée du réacteur

III.2.3 - Variations du débit

III.3 - Fluctuations de la température d'entrée t_3

Conclusion

Introduction

Le réacteur ayant été réalisé, des perturbations peuvent modifier les valeurs des variables (ou des paramètres) qui avaient été définies) ou utilisées) lors de l'établissement du projet .

Ainsi nous nous intéresserons aux quelques perturbations suivantes : vieillissement du catalyseur, variations du débit, variation de la composition du mélange à l'entrée du réacteur, variation de la température d'entrée du premier lit .

On a déjà constaté (§ II.1.2) l'influence de quelques unes d'entre elles sur le fonctionnement du réacteur . On simulera de même au cours de ce chapitre l'influence des autres perturbations étudiées .

Il sera ainsi possible à l'ingénieur d'exploitation, en comparant la marche de son réacteur (température de sortie des lits et conversion globale en particulier) avec les résultats de nos simulations, de connaître l'état du réacteur (degré de vieillissement du catalyseur) où les perturbations auxquelles il est soumis (variations du débit, de la composition du mélange, de la température d'entrée ...) .

Nous décrivons d'abord la méthode générale utilisée pour déterminer les réglages propres à contrecarrer l'action des différentes perturbations sur le réacteur . Notre étude se limite à celle d'un réacteur à trois lits refroidi par injection de réactif frais, la généralisation à N lits ou à un autre mode de refroidissement ne présentant aucune difficulté théorique .

Pour chacune des perturbations étudiées, nous donnons ensuite les résultats de la simulation et les résultats obtenus avec les réglages calculés par la méthode d'optimisation que nous proposons .

III.1 - Exposé du problème - Méthode de résolution proposée

On dispose pour un réacteur à trois lits de six variables de décision. Au chapitre II, nous avons choisi g_1' , g_2' , g_3' , λ_2 , t_3 et $z = \lambda_3 t_3$ pour des raisons de commodités de calcul. Mais, nous avons déjà signalé que les variables de décision "naturelles" étaient en fait : W_1 , W_2 , W_3 , t_3 , λ_2 et λ_3 . On voit beaucoup mieux sur ces dernières variables que lorsque le réacteur est réalisé, la modification de W_1 , W_2 , W_3 ne peut être envisagée car elle entraînerait un arrêt de fabrication. Ainsi donc les seules variables sur lesquelles nous pouvons agir pour optimiser le fonctionnement du réacteur sont t_3 , λ_2 et λ_3 . Néanmoins et toujours pour des raisons de commodité de calcul, nous avons conservé ici, g_1' , g_2' , g_3' , λ_2 , t_3 et z comme variables de décision. Mais elles seront soumises aux contraintes suivantes, exprimant que W_1 , W_2 et W_3 sont constantes :

$$f_1 = \frac{W_1}{G} - \int_{\lambda_2 g_2'}^{g_1'} \frac{dg}{R_1(g)} = 0 \quad (\text{III.1.1})$$

$$f_2 = \frac{W_2}{G} - \lambda_2 \int_{\frac{z g_3'}{\lambda_2 t_3}}^{g_2'} \frac{dg}{R_2(g)} = 0 \quad (\text{III.1.2})$$

$$f_3 = \frac{W_3}{G} - \frac{z}{t_3} \int_0^{g_3'} \frac{dg}{R_3(g)} = 0 \quad (\text{III.1.3})$$

Pour former une fonction objectif F_1' qui tienne compte de ces contraintes, on introduit les multiplicateurs de LAGRANGE l_1 , l_2 et l_3 :

$$F_1' = g_1' - \mu z - 0 \sum_{i=1}^3 \frac{W_i}{G} + \sum_{i=1}^3 l_i f_i$$

Les dérivées de F_1' par rapport aux variables g_1' , g_2' , g_3' , z , λ_2 , t_3 , l_1 , l_2 , l_3 s'annulent nécessairement à l'optimum.

III.1.1 - Calcul des dérivées de la fonction objectif modifiée

$$* \quad \frac{\partial F_1'}{\partial g_1'} = 1 - \frac{l_1}{R_1(g_1')} = 0$$

soit

$$R_1(g_1') = l_1$$

(III.1.4)

$$* \frac{\partial F_1'}{\partial g_2'} = \frac{l_2}{R_2(g_2')} - \frac{l_1}{R_1(g_1')} = 0 \quad \text{qui donne la relation}$$

$$\frac{R_2(g_2')}{l_2} = \frac{R_1(g_1')}{l_1}$$

(III.1.5)

$$* \frac{\partial F_1'}{\partial g_3'} = 0 \quad \text{conduit de la même façon à :}$$

$$\frac{R_3(g_3')}{l_3} = \frac{R_2(g_2')}{l_2}$$

(III.1.6)

$$* \frac{\partial F_1'}{\partial \lambda_2} = \frac{g_2' l_1}{R_1(g_1')} - l_2 \int_{g_2}^{g_2'} \frac{dg}{R_2(g)} - \frac{l_2 \approx g_3'}{l_2 l_3} \cdot \frac{1}{R_2(g_2')}$$

$$- l_2 \lambda_2 \int_{g_2}^{g_2'} \frac{1}{R_2(g)} \left(\frac{1}{R_2(g)} \right) dg = 0$$

soit en tenant compte de la relation (III.1.5)

$$\frac{g_2'}{R_2(g_2')} - \frac{g_2}{R_2(g_2')} - \int_{g_2}^{g_2'} \left\{ \frac{1}{R_2(g)} + \frac{t_2 - g_2}{R_2^2(g)} \frac{\partial}{\partial t} (R_2(g)) \right\} dg = 0$$

(III.1.7)

On remarque que cette relation est identique à la relation (II.1.8) obtenue lors de l'établissement des relations permettant l'optimisation du réacteur au stade projet .

$$* \quad \frac{\partial F'_1}{\partial t_3} = - \frac{l_2 z g'_3}{t_3^2 R_2(g)} + \frac{l_3 z}{t_3^2} \int_0^{g'_3} \frac{dg}{R_3(g, g+t_3)} - \frac{l_3 z}{t_3} \int_0^{g'_3} \frac{\partial}{\partial t_3} \left(\frac{1}{R_3(g, g+t_3)} \right) dg = 0$$

donne la relation .

$$\boxed{\int_0^{g'_3} \left\{ \frac{1}{R_3(g)} + \frac{t_3}{R_3^2(g)} \cdot \frac{\partial}{\partial t} R_3(g, g+t_3) \right\} dg - \frac{g'_3}{R_3(g'_3)} = 0} \quad (\text{III.1.8})$$

cette relation est aussi identique à la relation (II.1.8)

Le calcul de $\frac{\partial F'_1}{\partial z}$ conduit à une relation inutilisable . La dérivation de F'_1 par rapport à l_1 , l_2 , l_3 donne naturellement les relations III.1.1, III.1.2, III.1.3 .

III.1.2 - Exploitation des relations obtenues

Pour réaliser un programme permettant l'optimisation du réacteur lorsque la longueur des lits catalytiques est fixée, nous utilisons les relations III.1.1, III.1.2, III.1.3 et les relations III.1.7 et III.1.8 . L'organigramme (figure III.2) décrit l'exploitation de ces relations . Les valeurs, qui doivent être déterminées à partir de ces relations, apparaissent comme bornes d'intégrales . Le calcul analytique de ces intégrales serait extrêmement pénible mais pas impossible . On pourrait donc obtenir des relations explicites dont le calcul serait rapide . Mais cela tient à la forme mathématique de la cinétique choisie . Il se peut dans d'autres cas que la loi de vitesse soit donnée sous forme de tableaux de valeurs numériques ou que l'expression de la loi de vitesse varie suivant les domaines de températures et de concentrations que l'on considère . Toutes ces caractéristiques rendent impossible en pratique le calcul analytique des intégrales .

Le recours à une méthode numérique est donc nécessaire pour déterminer par exemple g'_1 tel que :

$$H(g'_1) = \int_{g_1}^{g'_1} \frac{dg}{R_1(g)} = 0 \quad (\text{III.1.9})$$

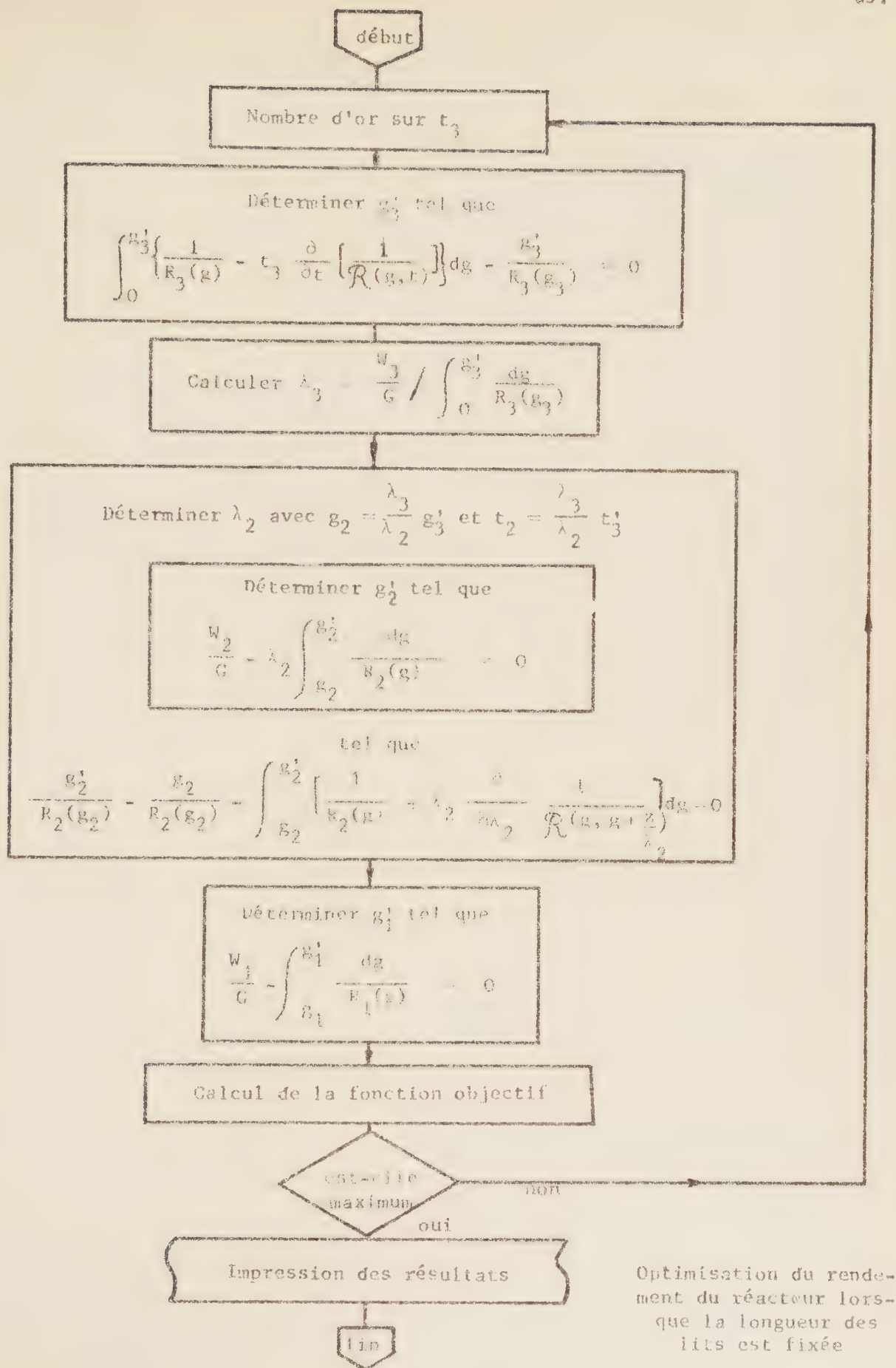


Figure III.2

La méthode qui semble a priori la mieux adaptée à la résolution de ce problème est la méthode de la subdivision binaire. Nous connaissons en effet l'intervalle de recherche : g'_i se trouve obligatoirement sur le segment d'adiabatique limité par les points (g_i, t_i) et (g'_0, t'_0) , ce dernier point étant déterminé par l'intersection de l'adiabatique avec la courbe d'équilibre $R = 0$. La détermination de (g'_0, t'_0) est elle-même, et pour les raisons évoquées plus haut, effectuée par subdivision binaire. Cette subdivision est arrêtée lorsque l'intervalle final est inférieur à une certaine valeur ϵ que l'on impose a priori. On choisit ensuite comme borne supérieure de l'intervalle de recherche de g'_i , la borne inférieure de l'intervalle final (de longueur ϵ) de recherche de g'_0 (figure III.1), qui est tel que $R = 0$. Au cours des calculs que nous effectuons pour trouver le réacteur optimal, il arrive que le point g'_i soit extrêmement voisin de g'_0 . Il se peut donc que nous l'ayons involontairement exclu de l'intervalle de recherche auquel cas la méthode de la subdivision binaire ne peut pas donner le résultat. On pourrait penser qu'il suffit de diminuer ϵ pour que cet ennui disparaisse. Mais l'exemple numérique rapporté dans le tableau III.1 montre qu'on ne peut pas réduire indéfiniment ϵ . Le nombre de chiffres significatifs pris en compte par l'ordinateur (l'équivalent de 7 chiffres décimaux en simple précision, 10 en précision étendue pour l'ordinateur IBM 1800) limite cette réduction de ϵ . On voit ainsi dans le tableau III.1 que g'_0 et g'_i sont dans l'intervalle $2,1284631454 - 2,1284631455$ sans que nous puissions numériquement les discerner.

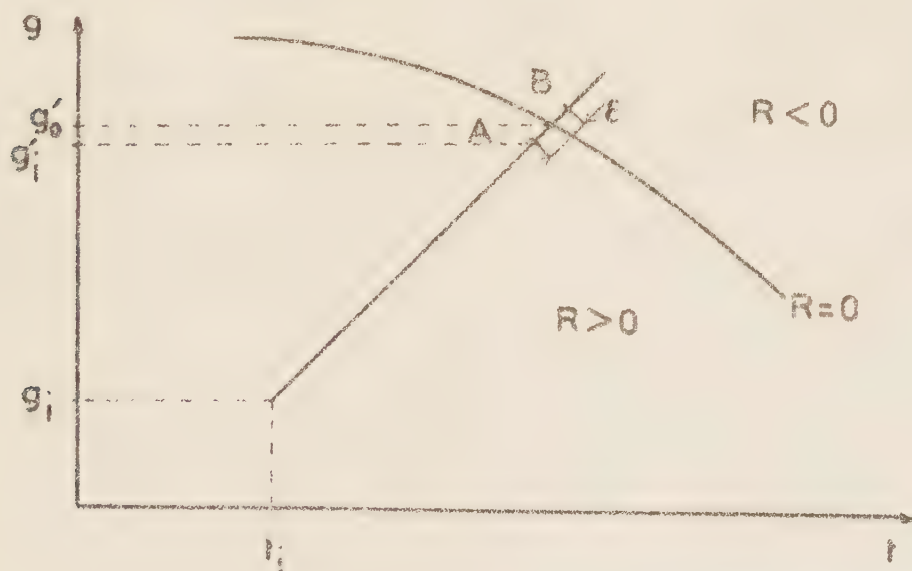


Figure III - Recherche de g'_i vérifiant la relation

$$H(g'_i) - \int_{g_i}^{g'_i} \frac{dg}{R_i(g)} dg = 0$$

On pourrait, moyennant certaines précautions, utiliser le second point (B) comme borne supérieure de l'intervalle de recherche de g_2' , mais la détermination de ces deux valeurs étant extrêmement coûteuse en temps de calcul on préfère utiliser la méthode beaucoup plus simple que nous proposons : on cherche le minimum du carré ou de la valeur absolue de

$$H(g_1') = \int_{g_1}^{g_1'} \frac{dg}{R_1(g)}$$

dans l'intervalle (g_1, t_1) et (g_0', t_0') . Dans les cas où g_1' est dans cet intervalle, on trouve la même valeur qu'avec la méthode de la subdivision binaire. Mais dans le cas particulier présenté dans le tableau III-1, nous obtenons $g_2' = 2,12845$ qui est une approximation suffisante de g_2' pour nous permettre de continuer les calculs.

valeur obtenue par subdivision
binaire telle que $R = 0$ (précision sur $t_2' : 10^{-4}$)

nombre de chiffres maximum pris
en compte par l'ordinateur
(précision étendue)

g_2'	$\lambda_2 \int_{g_2}^{g_2'} \frac{dg}{R_2(g)}$
2,128450000	0,153
2,128463000	0,214
2,1284631454	0,307
2,1284631455	∞

Tableau III.1 - Recherche de g_2' tel que $0,646 - \lambda_2 \int_{g_2}^{g_2'} \frac{dg}{R_2(g)} = 0$

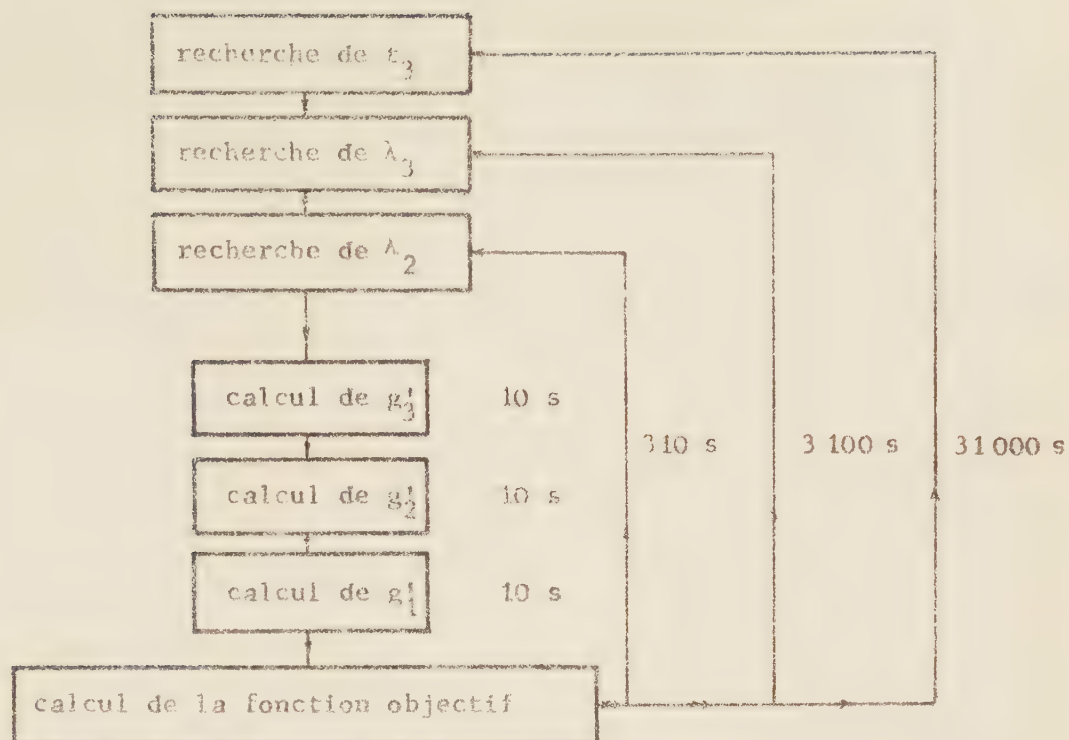


Figure III.3

Evaluation du temps de calcul de l'optimum avec une méthode de recherche directe

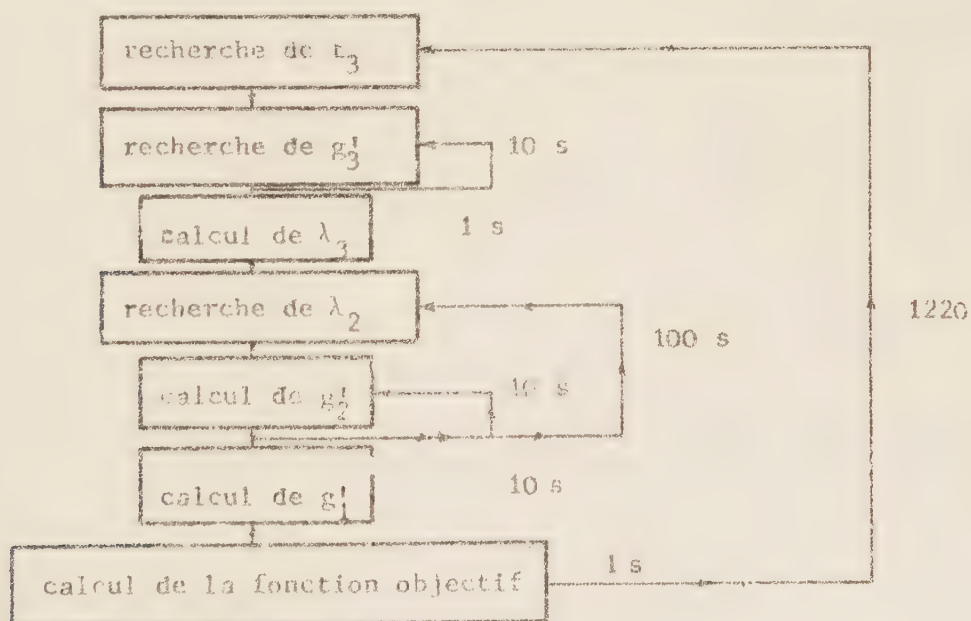


Figure III.3 - Avec notre méthode

III.1.3 - Temps de calcul - Précision

Quinze minutes de calcul sur l'ordinateur IBM 1800 sont nécessaires pour l'optimisation du réacteur à trois lits soumis à une perturbation quelconque, en utilisant le programme dont l'organigramme est donné par la figure III.2 . La précision relative demandée pour la détermination des variables de décision est dans ce cas de 10^{-3} .

On peut ainsi remarquer qu'un problème d'optimisation à six variables sans contrainte est plus rapidement résolu (4 mn 40 s) qu'un problème d'optimisation à trois variables soumises à des contraintes .

Nous n'avons pas trouvé de travaux permettant d'effectuer des comparaisons mais nous pouvons évaluer, comme au chapitre II le gain théorique de temps de notre méthode par rapport à une méthode de recherche directe . Faisons l'hypothèse que la détermination d'une variable de décision demande dix calculs, de l'une des relations que nous utilisons, ou de la fonction objectif . Attribuons à ces calculs une durée de 1 seconde et portons au niveau de chaque calcul les temps nécessaires (figures III.3.1 et III.3.2) .

Nous voyons par exemple figure III.3.1 que pour un t_3 , un λ_3 et un λ_2 fixés, il faut 10 s pour calculer g_3^1 , 10 s pour calculer g_2^1 , 10 s pour déterminer g_1^1 et enfin 1 s pour calculer la valeur correspondante de la fonction objectif soit au total 31 s . Ce temps est multiplié par 1000 du fait des essais nécessaires pour déterminer t_3 , λ_3 et λ_2 tels que la fonction objectif soit optimum . Soit donc au total 31000 s .

Avec notre méthode, un calcul identique (figure III.3.2) nous donne une durée de 1220 s ce qui concorde bien avec les 15 mn trouvées .

Cette méthode va nous permettre de trouver les réglages à effectuer sur t_3 , λ_3 et λ_2 pour optimiser la valeur de la fonction objectif du réacteur lorsque celui-ci sera soumis à des perturbations .

III.2 - Résultats

III.2.1 - Vieillissement du catalyseur

Différents phénomènes ont pour effet de diminuer l'activité du catalyseur et l'on doit envisager son remplacement périodique (le coefficient économique δ en tient d'ailleurs compte) .

Supposons que le vieillissement du catalyseur se traduise par une réduction d'un certain pourcentage de la vitesse de réaction :

$$R^*(g, t) = \alpha . R(g, t)$$

où α est un coefficient que nous ferons varier de 1 à 0,5 et $R(g, t)$ est la vitesse donnée par la relation (I.2.1.2) .

III.2.1.a - Simulation des effets

Nous effectuons une étude préliminaire qui a pour but de montrer ce qui se passe si l'on n'effectue aucun réglage propre à compenser les effets du vieillissement du catalyseur. On peut utiliser à cet effet, le programme mis au point pour l'étude de l'influence des variations des paramètres ou des variables de décision au voisinage de l'optimum (§ II.1.2). Les résultats sont donnés dans le tableau III.2 et la figure III.4.

α	t_3'	t_2'	t_1'	g_1'	fonction objectif
1,00	5,497	4,594	4,136	2,450	2,122
0,999	5,496	4,593	4,136	2,450	2,122
0,998	5,495	4,592	4,136	2,450	2,122
0,990	5,473	4,576	4,134	2,447	2,119
0,985	5,464	4,546	4,123	2,437	2,108
0,980	5,434	4,448	3,977	2,290	1,962
0,975	5,388	4,252	3,540	1,854	1,525
0,970	5,326	4,023	3,200	1,513	1,185
0,950	5,027	3,449	2,642	0,955	0,627
0,900	4,532	2,967	2,257	0,571	0,100

Tableau III. 2

Variations du coefficient d'activité du catalyseur

$$\delta = 0,03125 \quad \mu = 0,150 \text{ (sans réglage)}$$

On remarque la baisse brutale de la valeur de la fonction objectif et, à partir de la valeur de $\alpha = 0,75$, on peut considérer le réacteur comme éteint.

Afin de permettre à l'ingénieur d'exploitation de déterminer l'apparition du phénomène de vieillissement du catalyseur, nous donnons les valeurs de variables facilement mesurables : les températures t_3' , t_2' et t_1' . On remarque que ces grandeurs varient dans le même sens que α , ce qui est normal. La température t_1' semble peu sensible aux diminutions initiales de α (jusqu'à $\alpha = 0,985$) pour devenir ensuite extrêmement sensible. La détection de la baisse d'activité du catalyseur sera beaucoup plus sensible par la mesure de t_3' ou t_2' .

III.2.1.b - Détermination des réglages

Le tableau III.3 donne les résultats obtenus avec un réacteur "stabilisé" par addition a priori d'un excès de catalyseur (10 %) dans le lit 3.

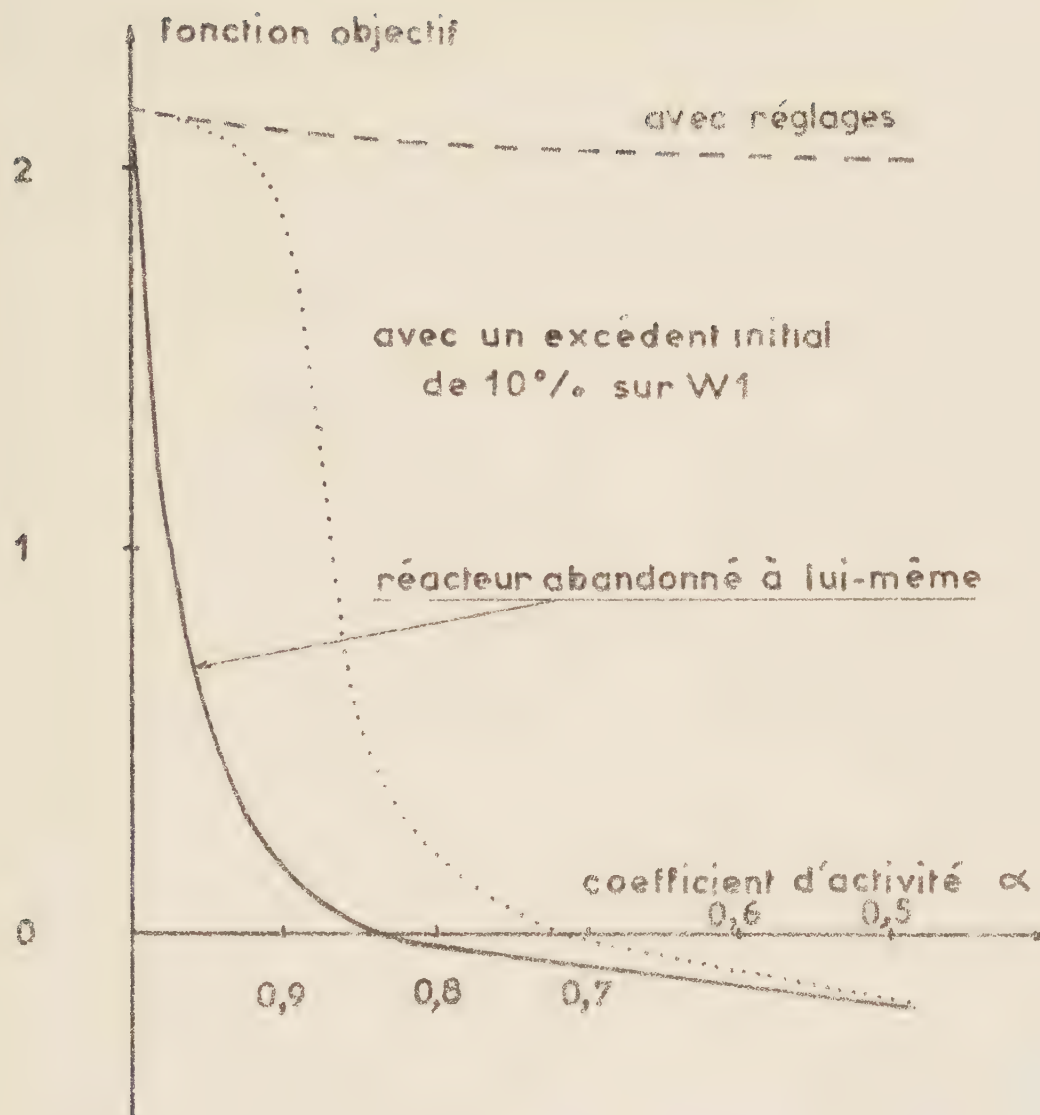


Figure III.4 - Vieillissement du catalyseur

Remarquons que le lit étant faiblement chargé en catalyseur, cet excès ne représente que 1 % de la masse totale de catalyseur. Les résultats obtenus (figure III.4) par cette simple modification sont donc appréciables puisque un faible excès de catalyseur retarde l'extinction du réacteur et nous donne la possibilité de détecter l'apparition du phénomène avant qu'il ne soit trop tard (la tangente pour $\alpha = 0$ est pratiquement horizontale alors que dans le cas du réacteur optimum sans excès de catalyseur elle est sensiblement verticale).

α	t_3'	t_2'	t_1'	g_1'	fonction objectif
1,00	5,499	4,596	4,136	2,450	2,120
0,998	5,499	4,596	4,136	2,450	2,120
0,990	5,499	4,593	4,136	2,450	2,120
0,985	5,499	4,591	4,135	2,449	2,119
0,980	5,499	4,590	4,135	2,449	2,119
0,975	5,499	4,588	4,134	2,447	2,118
0,970	5,499	4,586	4,133	2,447	2,117
0,950	5,499	4,570	4,127	2,440	2,111
0,900	5,476	4,453	3,916	2,230	1,900
0,80	4,417	2,874	2,186	0,500	0,170

Tableau III.3

Variations de α pour un réacteur ayant un excédent
initial de 10 % de catalyseur dans le lit 3
(sans réglage)

Plus intéressants encore sont les résultats tableau III.4 et figure III.4 obtenus par les réglages de t_3 , λ_3 et λ_2 déduits de l'optimisation du réacteur suivant la méthode que nous avons proposée : on multiplie au moins par deux la durée d'utilisation du catalyseur ; sans réglage, le réacteur s'éteint pour $\alpha = 0,75$; avec les réglages proposés, pour $\alpha = 0,50$, la valeur de la fonction objectif n'est diminuée que de 3 %. On bénéficie d'autre part d'une optimisation au second degré car le coût de l'amortissement du catalyseur diminue. (Il faudrait modifier δ en conséquence) .

α	FONCTION OBJECTIF	t_3	λ_3	λ_2	g'_1
1	2,122	3,456	0,488	0,759	2,450
0,98	2,120	3,460	0,490	0,761	2,450
0,96	2,118	3,467	0,491	0,761	2,449
0,94	2,117	3,474	0,492	0,762	2,449
0,92	2,115	3,482	0,493	0,763	2,448
0,90	2,113	3,490	0,494	0,763	2,447
0,85	2,111	3,509	0,495	0,764	2,445
0,80	2,104	3,530	0,498	0,765	2,443
0,75	2,099	3,552	0,501	0,767	2,441
0,70	2,093	3,576	0,504	0,769	2,438
0,65	2,086	3,603	0,506	0,770	2,435
0,60	2,079	3,631	0,510	0,772	2,432
0,50	2,062	3,697	0,517	0,775	2,424

Tableau III.4

Réglages du réacteur lorsque α diminueIII.2.2 - Variations de la composition du mélange à l'entrée du réacteur

La vitesse de réaction du mélange dépend de sa composition à l'entrée du réacteur. Si cette composition varie au cours de l'exploitation du réacteur, il convient de modifier les variables sur lesquelles nous pouvons encore agir, c'est-à-dire toujours t_3 , λ_3 et λ_2 . Nous avons ainsi déterminé, à l'aide de notre méthode d'optimisation les réglages à effectuer dans le cas où la teneur en SO_2 varie de 7,2 moles % à 8,4 moles % (le réacteur ayant été étudié pour une teneur de 7,8 %). Les résultats sont donnés dans les tableaux III.5 et III.6. On remarque que si l'augmentation de la teneur en SO_2 affecte peu la marche du réacteur, qu'il y ait ou non réglage par action sur t_3 , λ_3 et λ_2 , il n'en est pas de même lorsque cette teneur en SO_2 baisse. Dans ce cas, si l'on n'effectue aucun réglage, on constate des pertes de rendement inadmissibles, par contre, si l'on règle t_3 , λ_3 et λ_2 suivant les valeurs données dans le tableau III.6, on conserve un rendement acceptable.

SO ₂ moles %	O ₂ moles %	N ₂ moles %	fonction objectif	t ₃	λ ₃	λ ₂	% conversion à la sortie
7,2	10,87	81,93	1,940	3,475	0,511	0,778	98,3
7,4	10,85	81,75	2,000	3,466	0,504	0,772	98,2
7,6	10,82	81,58	2,060	3,458	0,497	0,767	98,1
7,8	10,80	81,40	2,118	3,449	0,490	0,761	98
8,0	10,78	81,22	2,176	3,440	0,483	0,755	97,8
8,2	10,75	81,05	2,233	3,432	0,476	0,749	97,7
8,4	10,73	80,87	2,290	3,424	0,470	0,744	97,6

Tableau III.6

Variations de la teneur en SO₂ du mélange avec
réglage sur t₃ , λ₂ et λ₃

SO ₂ moles %	O ₂ moles %	N ₂ moles %	fonction objectif	% conver- sion sortie
7,2	10,87	81,93	1,077	60,6
7,4	10,85	81,75	1,546	78,8
7,6	10,82	81,58	1,999	95,4
7,8	10,80	81,40	2,118	98,0
8,0	10,78	81,22	2,171	97,9
8,2	10,75	81,05	2,222	97,6
8,4	10,73	80,87	2,271	97,3

Tableau III.5

Variations de la teneur en SO₂ sans aucun réglage

Dans ce cas, si l'on n'effectue aucun réglage, on constate des pertes de rendement inadmissibles par contre si l'on règle t_3 , λ_3 et λ_2 suivant les valeurs données dans le tableau III.6 on conserve un rendement acceptable.

On peut remarquer que, pour la composition retenue lors de l'étude du réacteur au stade projet (7,8 moles % de SO_2 , 10,8 moles % de O_2 et 81,4 moles % de N_2) la valeur de la fonction objectif est de 2,118 alors que nous trouvions précédemment 2,122 (tableau III.5). En fait, cette différence est due à l'évaluation des coefficients a_0 et a_1 (§ 1.2.1) qui sont calculés à partir de la composition du mélange et valent respectivement 2,497 et 3,457. Or, au stade du projet, nous avons utilisé les valeurs approchées $a_0 = 2,5$ et $a_1 = 3,46$, ceci afin de pouvoir comparer nos résultats avec ceux des auteurs précédents qui avaient déjà fait cette approximation (LEE et ARIS, HELLINCKX et VAN ROMPAY ...). Le coefficient a_2 vaut 32,01 dans les deux cas.

III.2.3 - Variations de débit

Le réacteur a été étudié pour produire un certain tonnage (ici 50 T d'acide sulfurique par jour). Malheureusement, on peut être contraint de diminuer, ou plus souvent d'augmenter sa production. On se propose donc de déterminer les réglages à effectuer pour minimiser le coût d'une production quelconque dans un réacteur construit pour une production donnée. Cette étude permet également d'évaluer l'influence des variations de débit aléatoires et le cas échéant d'envisager une régulation du réacteur par action sur t_3 , λ_3 et λ_2 .

Le tableau III.7 donne les résultats obtenus dans les quatre cas suivants :

- 1er cas : Réacteur optimisé au stade du projet pour le débit considéré (la fonction objectif prend alors sa valeur maximum).
- 2e cas : Réacteur optimisé au stade du projet pour une production de 50 T/jour de SO_4H_2 pur, soumis aux variations du débit sans que l'on modifie les réglages et en supposant que la quantité de chaleur fournie à l'échangeur est constante : t_3 va donc croître lorsque le débit diminue et vice et versa.
- 3e cas : identique au précédent mais avec t_3 constant : la quantité de chaleur fournie à l'échangeur varie en fonction du débit.
- 4e cas : Réacteur optimisé au stade projet pour une production de 50 T/jour de SO_4H_2 pur dont nous réglons t_3 , λ_3 et λ_2 (W_1, W_2, W_3 restant constants) de façon à optimiser la valeur de la fonction objectif F_d .

L'expression de F_d est obtenue par modification de F'_1 .

λ_1	fonction objective				t_3	g_1^*	L_3	t_3	g_1^*	4e cas			g_1^*
	1er cas	2e cas	3e cas	4e cas						L_3	t_3	g_1^*	
1,5	3,183	adéquat	adéquat	3,170			3,595	0,505	0,750			2,456	
1,4	2,971	"	"	2,962			3,569	0,503	0,753			2,439	
1,3	2,759	"	"	2,754			3,543	0,499	0,766			2,442	
1,2	2,546	"	0,006	2,544			3,515	0,497	0,764			2,445	
1,1	2,334	- 0,262	0,318	2,333		3,137	3,486	0,493	0,761			2,447	
1,00	2,122	2,112	4,122	2,122		3,452	3,452	0,488	0,760			2,450	
0,90	1,910	1,860	1,904	1,909		3,834	3,418	0,484	0,758			2,454	
0,80	1,698	1,592	1,683	1,691		4,313	3,379	0,480	0,753			2,457	
0,70	1,485	1,313	1,463	1,480		4,929	3,335	0,474	0,751			2,460	
0,60	1,273	1,021	1,244	1,266		5,750	3,286	0,467	0,747			2,464	
0,5	1,061	0,708	1,024	1,044		6,900	3,230	0,461	0,752			2,468	

Tableau III.7

Variations du débit

1er cas : Optimisation au stade du projet

3e cas : t_3 constant2e cas : t_3 variant avec le débit4e cas : avec réglage optimum sur t_3 , λ_3 , λ_2

$$F_1 = G_1 F_1' = p G_{1/3} t_3 + \frac{p}{1-p} (1 - G_1) t_1$$

avec $G_1 = \frac{G_e}{G_p}$ où G_e est le débit étudié
 G_p le débit retenu lors de
l'établissement du projet

Des résultats résumés dans le tableau III.7, on peut déduire que si la régulation par action sur t_3 (2^e et 3^e cas) ne présente pas un avantage énorme sur le maintien de t_3 à une valeur constante (3^e cas) lorsque G_1 est inférieur à 1 ; elle est au contraire très intéressante lorsque G_1 est supérieur à 1 . La valeur de la fonction objectif reste très voisine de la valeur maximale possible alors que l'extinction du réacteur est très rapide dans les cas 2 et 3 .

Ces résultats nous permettent encore une fois d'apprécier l'intérêt des réglages du réacteur que nous pouvons déduire de l'utilisation de la méthode d'optimisation proposée .

III.3 - Fluctuations de la température d'entrée t_3

Nous avons noté au paragraphe II.1.2 l'extrême sensibilité du réacteur optimal aux variations de la température t_3 . La première solution que nous avons proposée pour remédier à la baisse brutale de la valeur de la fonction objectif était d'augmenter a priori le poids de catalyseur déposé dans le lit 3 . De même que dans le cas de baisse d'activité du catalyseur où nous avons déjà proposé cette solution, le résultat obtenu est un retard de la chute brutale de la valeur de la fonction objectif .

Nous avons donc cherché une autre solution en étudiant les modifications possibles de λ_3 et λ_2 . La fonction objectif reste F_1' où l'on a remplacé z par sa valeur $\lambda_3 t_3$. Nous dérivons cette fonction par rapport aux variables $g_1', g_2', g_3', \lambda_2, \lambda_3, l_1, l_2, l_3$. Mais nous n'utilisons que la solution obtenue par dérivation par rapport à λ_2 qui s'écrit encore :

$$\frac{g_2'}{R_2(g_2')} - \frac{R_2}{R_2'(g_2')} - \int_{g_2}^{g_2'} \left\{ \frac{1}{R_2'(g)} + \frac{t_2 - R_2}{R_2'^2(g)} \cdot \frac{d}{dg} [R_2(g)] \right\} dg = 0$$

L'algorithme de calcul adopté est décrit par l'organigramme de la figure III.5 . Les résultats numériques obtenus sont rapportés dans le tableau III.7 et la figure III.6 . L'intérêt de la régulation par action sur λ_2 et λ_3 apparaît clairement . Il est évident que l'on peut aussi réguler t_3 mais une régulation de température n'est pas chose facile et il peut être plus simple de modifier les réglages des vannes .

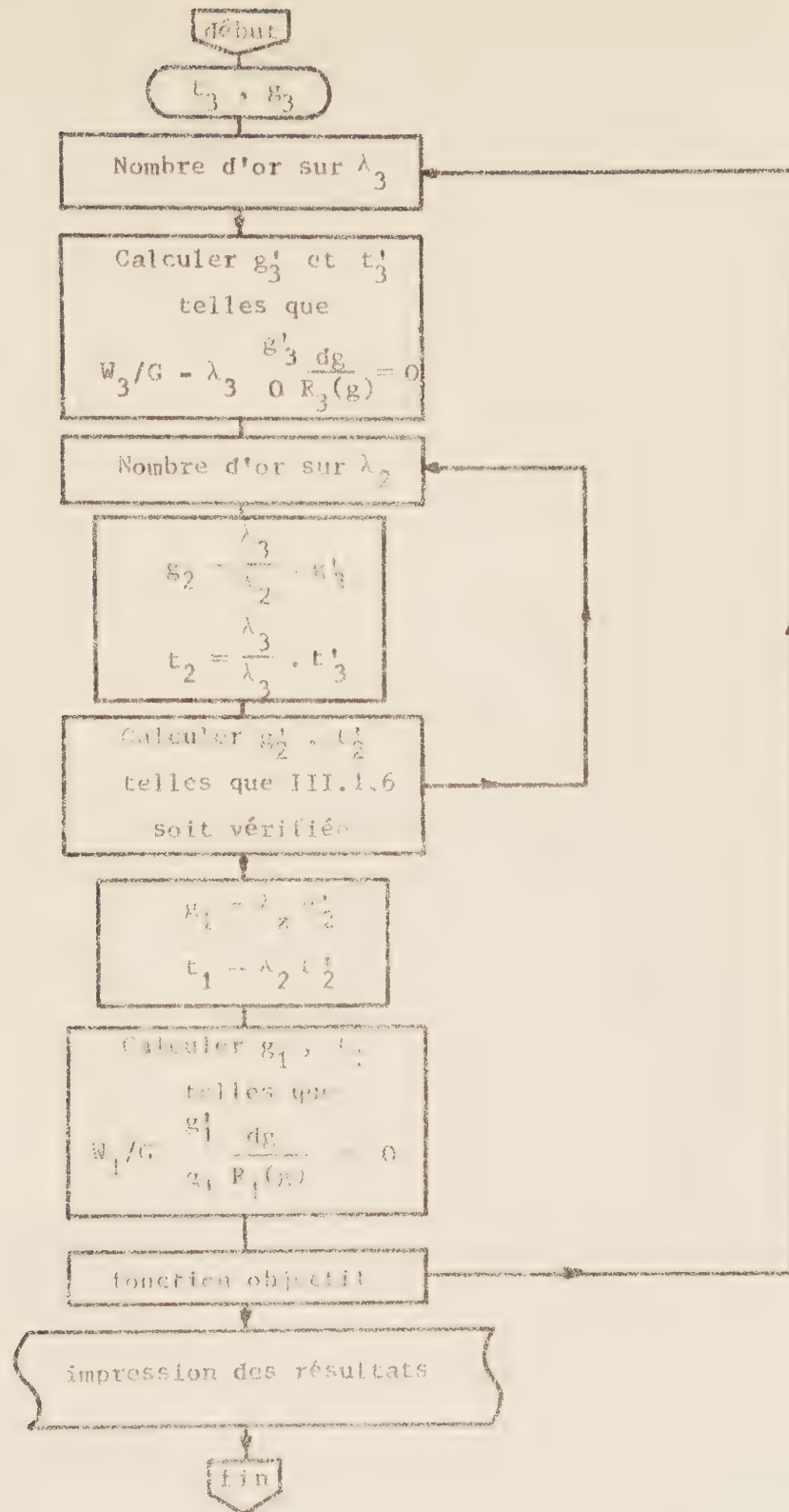
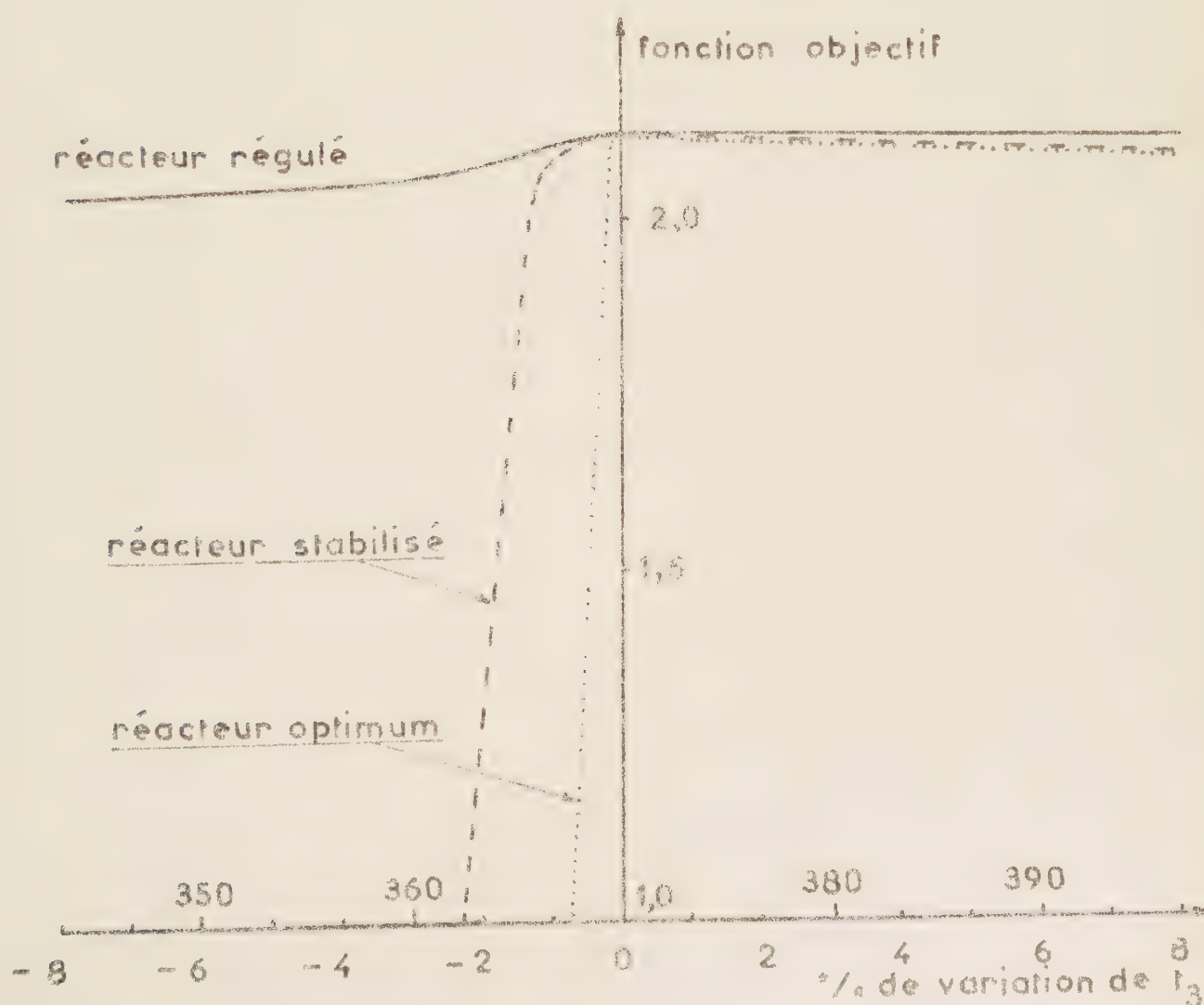


figure III.5

Organigramme du programme d'étude des variations de t_3 avec optimisation sur λ_2 et λ_1 .

variation	t_2	t_1	t_3	t_4	fonction objective
- 8	3,175	0,634	0,635	2,414	2,099
- 5	3,279	0,645	0,609	2,417	2,092
- 3	3,348	0,655	0,589	2,421	2,050
0	3,416	0,759	0,488	2,450	2,122
+ 3	3,506	0,755	0,474	2,449	2,131
+ 5	3,625	0,752	0,472	2,449	2,126
+ 8	3,728	0,747	0,462	2,448	2,119

Tableau III.7

réglages sur t_2 et t_3 lorsque T_3 varieFig. III.6 - Variation de la fonction objectif lorsque T_3 varie

Nous n'avons pas étudié de régulateur agissant sur v_2 , A_2 et A_1 c'est-à-dire en fait sur le réglage des vannes et sur le débit du réacteur, car dans la pratique, on est rarement maître de ce dernier paramètre.

CONCLUSION

Les résultats de ce chapitre confirment ceux obtenus au cours du second chapitre. Tout ce qui tend à empêcher la réaction de s'amorcer dans le lit 3 est contreproductif (taux α de τ_3 , augmentation de λ_3 , vieillissement du catalyseur ...). Ainsi est soulignée l'importance du bon fonctionnement de ce premier lit. Nous avons montré qu'une faible quantité de catalyseur ajoutée à la charge optimale calculée pour le lit 3 facilitait la conduite du réacteur et nous laissait le temps de détecter les perturbations qui réduisaient son rendement. Nous avons également montré l'intérêt de fréquents réglages sur les valeurs des variables τ_3 , λ_3 et λ_2 .

Le temps de calcul nécessaire pour l'optimisation du réacteur à longueurs de lits fixées est assez important. Il peut néanmoins être diminué en réduisant les intervalles de recherche et la précision demandée. On pourrait ainsi envisager la régulation de réacteur par un ordinateur industriel.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Le point de départ de notre travail a été une publication de LEE et ARIS dans laquelle les auteurs n'appliquaient pas correctement le principe de la programmation dynamique. Nous avons repris leurs hypothèses, leur fonction objectif, leur loi de vitesse et les valeurs de leurs paramètres économiques.

Grâce à l'utilisation des relations fournies par l'annulation des dérivées partielles de la fonction objectif, nous avons mis au point une méthode d'optimisation rapide et précise.

Cette méthode est générale car elle s'applique quelles que soient la forme de la fonction objectif, la loi de vitesse de réaction, les contraintes imposées et les valeurs des différents paramètres économiques.

La rapidité de notre méthode nous a permis d'effectuer une étude théorique de l'optimisation du fonctionnement du réacteur lorsqu'il est soumis à des perturbations. Cette étude n'avait jamais été effectuée jusqu'à maintenant car elle est plus complexe que celle du réacteur au stade du projet. La durée des calculs nécessaires est considérablement augmentée et si nos temps de calcul restent raisonnables, ceux des autres méthodes seraient tous prohibitifs.

Les résultats quantitatifs et mêmes qualitatifs peuvent varier en fonction des paramètres scientifiques (loi de vitesse ...), technologiques (contraintes thermiques, composition des gaz ...) ou économiques (prix du catalyseur, prix de la calorie) mais le principe de notre méthode reste valable et permet d'envisager la conduite optimale du réacteur par un ordinateur industriel.

Nomenclature

A_i	ième composant chimique	
a_i	coefficients de la loi de vitesse de réaction	
C_p	$\sum_i g_i \frac{\partial H_i}{\partial t}$ chaleur spécifique du mélange	kcal x kg ⁻¹ x °C ⁻¹
$F_1, F_1', \mathcal{F}_1$ ou F_d	fonction objectif lorsque le refroidissement est effectué par injecteur de réactif frais	
$F_2, F_2',$ ou $\mathcal{F}_2$	fonction objectif lorsque le refroidissement est effectué par échangeurs	
f_i	fonctions exprimant les contraintes sur les variables de décision	
G	débit total du mélange réactionnel traversant le réacteur	kg x heure ⁻¹
g	conversion	mole x kg ⁻¹
g_i	conversion à l'entrée du lit i	"
g_i'	conversion à la sortie du lit i	"
h_i	enthalpie molaire spécifique de A_i	kcal x mole ⁻¹
ΔH	chaleur de réaction	"
J	$= \Delta H / C_p$	kg x °C x mole ⁻¹
p_i	pression partielle de A_i dans le mélange	pascal
k	prix de l'unité de quantité de chaleur	francs x kcal ⁻¹
k_1, k_2	constante de la loi de vitesse de réaction	
l_i	multiplicateurs de Lagrange	
(g, t)	vitesse de réaction	mole x kg ⁻¹ x heure ⁻¹
$R_i(g)$	vitesse de réaction dans le lit i	"
T	température	°C
T_o	température du mélange entrant dans le réacteur	"
t	température réduite $t = (T - T_o) / J$	mole x kg ⁻¹
t_i	température d'entrée dans le lit i	"
t_i'	température de sortie du lit i	"
V_i	valeur d'une mole de A_i	francs x mole ⁻¹
W_i	poids de catalyseur dans le lit i	kg

Lettres grecques

α	coefficient d'activité du catalyseur	
α_i	coefficient stœchiométrique de A_i	
β	$\sum_i \alpha_i V_i$	franc x mole ⁻¹
ζ	γ / β	mole x kg ⁻¹ x heure ⁻¹
γ	coût d'amortissement du catalyseur	franc x kg ⁻¹ x heure ⁻¹
μ	$k C_p J / P$	
μ'	coefficient lié au coût du refroidissement par échangeurs	

N.B. : Nous rappelons que nous avons conservé le système d'unités défini par LEE et ARIS afin de pouvoir établir des comparaisons avec leurs résultats et ceux des autres chercheurs ayant repris leurs travaux .

BIBLIOGRAPHIE

- 1 WEYCHERT S. et URBANECK A., Int. Chem. Eng. 9 - 3 (1969)
- 2 CALDERBANK P.H., Chemical Engineering Progress, Vol. 49 N° 11 (1953)
- 3 LEE K.Y. et ARIS R., Ind. Eng. Chem., Process Design Develop 2 300 (1963)
- 4 RAFAL M. et DRANOFF J., Ind. Eng. Chem., Process Design Develop 5 128 (1966)
- 5 HORN F., Z. Electrochem, 65 295 (1961)
- 6 HORN F., KUCHLER L., Chem. Ing. Tech. 31 1 (1959)
- 7 ARIS R. "The optimal design of chemical reactors" Academic Press,
New York (1961)
- 8 DYSON D. et HORN F., Ind. Eng. Chem., Process Design Develop, 8 49 (1969)
- 9 PINGAULT L.M., Thèse - Faculté des Sciences de Paris (1967)
- 10 MALENGÉ J.P. et VILLERMAUX J., Ind. Eng. Chem., Process Design Develop
6 535 (1968)
- 11 FERRARIS G.B., Ing. Chim. Ital. 4 5 (1968)
- 12 HELLINCKX L. et VAN ROMPAY P., Ind. Eng. Chem., Process Design Develop
7 595 (1968)
- 13 MALENGÉ J.P., C.R. Acad. Sc. Paris 267 1651 (1968)
- 14 BELLMANN R. "Dynamic programming" . Princeton University Press (1957)
- 15 LEE K.Y. et ARIS R., Ind. Eng. Chem., Process Design Develop 2 306 (1963)
- 16 FAN L.T. et WANG C.S. "The discrete maximum principle" Wiley (1964)
- 17 KONOKI K., Kagaku Kagaku 21 408 (1957)
- 18 BHANDARKAR P. et NARSIMHAN G., Ind. Eng. Chem., Process Design Develop.
8 142 (1969)

- 19 CHATRAND G. et GROWE C., Cand. J. of Chem. Eng. 47 296 (1969)
- 20 OSTROVSKY C., Rapport de stage A.S.T.E.F.
- 21 OSTROVSKY C., MALENCE J.P., VINGENT L., IVe Congres Interamericain
de Génie Chimique, Buenos Aires (Avril 1969)
- 22 HELLINCKX L. et VAN ROMPAY P., 97e congrès de la Fédération Euro-
péenne de Génie Chimique, Florence (avril 1970)
- 23 MALENCE J.P., Ind. Eng. Chem., Process Design Develop.
- 24 WILDE D.J., Méthodes de Recherche d'un optimum, Dunod, Paris (1966)
- 25 DOUDAREL R., DELMAS, GUICHET P., Commande Optimale des Processus, Dunod
Paris (1968)
- 26 BADCUERAHANIAN L., Chimie et Industrie, Génie Chimique, vol. 101, n° 2
janvier (1969)
- 27 ARIS R., Elementary Chemical Reactor Analysis, Prentice-Hall (1969)

ANNEXE 1

Méthode d'intégration

Pour le calcul des intégrales du type $\int_{g_i}^{g_i'} \frac{dg}{R_t(g)}$ ou $\int_{g_i}^{g_i'} \frac{1}{R_t(g)} dg$, nous avons utilisé le programme CVCIT dont nous décrivons ci-dessous le principe.

Nous interpolons la fonction $f(x)$ à intégrer sur une base de polynômes de Tchebycheff. Les points d'interpolation étant les racines de polynômes de Tchebycheff.

Si nous voulons calculer $\int_{-1}^{+1} f(x) dx$, nous écrivons que :

$$f(x) = [T_0 \quad T_1 \quad \dots \quad T_n] \begin{bmatrix} L_T \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{Bmatrix}$$

où T_i est le polynôme de Tchebycheff de degré i .

$f_0, f_1 \dots f_n$ sont les valeurs de $f(x)$ calculées au point θ_i racines du polynôme de Tchebycheff $T_{n+1}(x)$.

$[L_T]$ est la matrice d'interpolation de Tchebycheff

$$[L_T] = \frac{2}{n+1} \begin{bmatrix} 0,5 & 0,5 & 0,5 & \dots & 0,5 \\ \cos \theta_0 & \cos \theta_1 & \cos \theta_2 & \dots & \cos \theta_n \\ \cos 2\theta_0 & \cos 2\theta_1 & \cos 2\theta_2 & \dots & \cos 2\theta_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \cos n\theta_0 & \cos n\theta_1 & \cos n\theta_2 & \dots & \cos n\theta_n \end{bmatrix}$$

en posant $x = \cos \theta$ $T_{n+1}(\theta) = \cos(n+1)\theta$

et les racines de $T_{n+1}(\theta)$ sont : $\theta_k = \frac{2k+1}{2n+2}\pi$ $k = 0, \dots, n$

$$\int_{-1}^{+1} f(x) dx = \left[\int_{-1}^{+1} T_0 dx \int_{-1}^{+1} T_1 dx \dots \int_{-1}^{+1} T_n dx \right] \begin{bmatrix} L_T \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} K_0 & K_1 & \dots & K_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_T \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{Bmatrix}$$

avec $K_i = 0$ si i impair

$K_i = -\frac{2}{i^2 - 1}$ si i pair

Pour calculer $I = \int_a^b f(t) dt$, nous effectuons le changement

de variable :

$$t = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x$$

On obtient alors $I = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{+1} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x\right) dx$

ANNEXE II

Nous rappelons rapidement les algorithmes de deux méthodes numériques que notre programme d'optimisation met en oeuvre : la méthode de recherche de la racine d'une équation par subdivision binaire, et la méthode de recherche d'un optimum dite du nombre d'or.

I - Méthode de la subdivision binaire

On cherche la racine de $f(x) = 0$ sachant que celle-ci est unique et se trouve dans un intervalle $[a, b]$ donné.

Pour résoudre ce problème, on se place au point $\alpha = \frac{a+b}{2}$

* si $f(\alpha)$ est du signe $f(a)$, on remplace a par α

* si $f(\alpha)$ est du signe $f(b)$, on remplace b par α

et on recommence l'opération avec le nouvel intervalle $[a, b]$ ainsi défini. Cet intervalle est réduit de moitié à chaque essai et on arrête la subdivision lorsque $[a, b]$ est inférieur à une certaine valeur ϵ donnée.

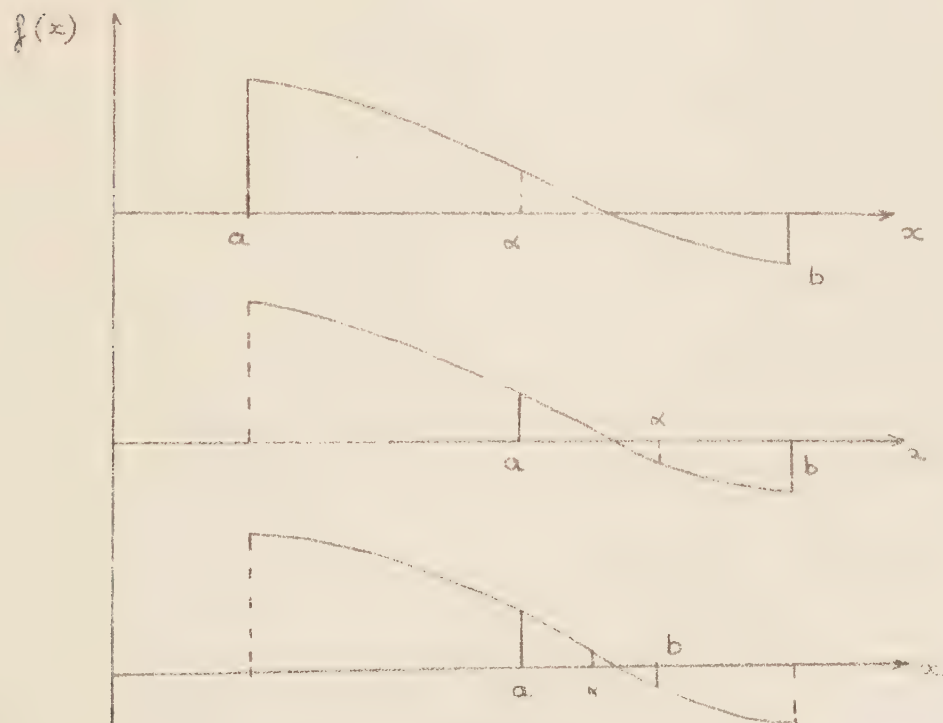


Figure 1

Réduction de l'intervalle a, b par la méthode de la subdivision binaire

Méthode du nombre d'or

On cherche le maximum de $f(x)$ sachant que celui-ci est unique et est obtenu pour une valeur de x comprise dans un intervalle $[a, b]$ donné .

On effectue un certain nombre d'expériences en calculant la valeur de la fonction en certains points x dont nous allons préciser les abscisses . Si j est le nombre des expériences déjà réalisées, on montre [1] que les emplacements des essais successifs doivent vérifier la relation :

$$L_{j-1} = L_j + L_{j+1} \quad (1)$$

où L_j est la longueur de l'intervalle restant après la réalisation de j expériences.

On maintient d'autre part constant et égal à τ le rapport des longueurs des intervalles d'incertitude successifs .

$$\frac{L_{j-1}}{L_j} = \frac{L_j}{L_{j+1}} = \tau \quad (2)$$

Soit en divisant les deux membres de (1) par L_{j+1}

$$\frac{L_{j-1}}{L_{j+1}} = \tau + 1$$

Or la relation (2) nous donne $\frac{L_{j-1}}{L_{j+1}} = \tau^2$

d'où $\tau^2 = \tau + 1$, la racine positive est $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1,618034$ ce nombre, connu depuis Euclide, est appelé nombre d'or .

Dans l'intervalle $[a, b]$ les abscisses correspondant aux deux premiers essais sont données par

$$x_1 = \frac{a^2 + b}{1 + \tau} \quad x_2 = \frac{a + a + b}{1 + \tau}$$

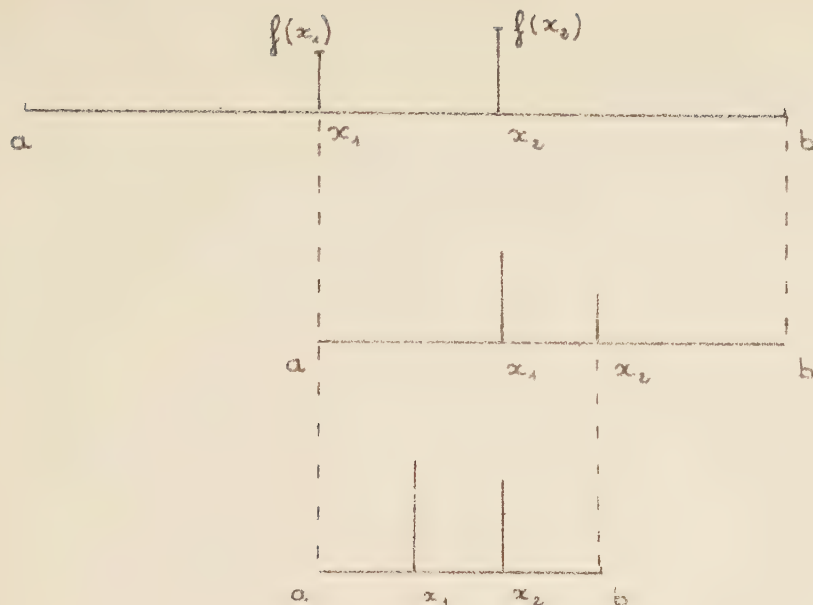


Figure 2 - Essais successifs par la méthode du nombre d'or

Après le premier essai, l'intervalle se réduit à :

$$I = \frac{(b - a)^{\tau}}{1 + \tau} \quad \text{or} \quad \tau^2 = \tau + 1 \quad \text{donc} \quad I = \frac{b - a}{\tau}$$

L'expérience qui est dans cet intervalle pour le rôle soit de x_1 soit de x_2 pour les deux expériences suivantes (fig. 2) .

A N N E X E I I I

LISTE DU PROGRAMME FORTRAN I.B.M. 1130-1800 D'OPTIMISATION

AU STADE DU PROJET

(Organigramme p. 31)

PROGRAMME PRINCIPAL C.R.S.F.

```

EXTERNAL CVPRH
DIMENSION AROND(54),R(9),RP(9)
COMMONU(122),V(122),REACT1,A1,A2,A3,EPS(5),DTG,XG,C1,C2,D3,ZMU,DELTA
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS
EQUIVALENCE(GM(1),AROND(1))
M=3
L=2
CALL CVCOF
READ(L,1)KAS
1 FORMAT(11)
READ(L,124)TMIN,TMAX,(EPS(I),I=1,5),ZMU,DELTA,CACT1,A1,A2,A3,NREA,
1IMAX
124 FORMAT(2F4.0,5E4.0,6F7.0,11,14)
WRITE(M,30)
30 FORMAT(1H), 'OPTIMISATION D'UN REACTEUR ADIABATIQUE A PLUSIEURS LI
1TS AVEC '/' REPROIDISSEMENT INTERMEDIAIRE PAR INJECTION DE REACTIFS
2 FRAIS '/' METHODE MALENGE-VINCENT '/'
GO TO (3,4),KAS
4 READ(L,5)GPM(1)
5 FORMAT(F5.0)
WRITE(M,6)GPM(1)
6 FORMAT(' CONTRAINTE SUR LA CONVERSION DE SORTIE GP(1)='F6.3)
3 WRITE(M,456)TMIN,TMAX,(EPS(I),I=1,5)
456 FORMAT(' TMIN='F6.3,5X,'TMAX='F6.3 '/' PRECISIONS '/' EPS1='E7.1' EP
152='E7.1' EPS3='E7.1' EPS4='E7.1' EPS5='E7.1' /)
WRITE(M,457)A1,A2,A3,CACT1
457 FORMAT(' COMPOSITION A L'ENTREE DU REACTEUR '/' SO2='F5.2,5X'O2='
1F5.2,5X,'N2='F5.2 '/' COEF D'ACTIVITE DU CATALYSEUR=(FT,3/)
WRITE(M,126)NREA,ZMU,DELTA,IMAX
126 FORMAT(' NB. DE LITS=' I2,' MU='F10.5,6X,'DELTA='F10.5,
15X,'IMAX=' I4/)
ZMU=ZMU*(A1*9.65+A2*7.03+A3*6.96)/7.17.73
ZMAS=(64.*A1+32.*A2+28.*A3)*1.E-5
ETA=(23098.*A1)/(12.106*A1-7.865*A2-7.06*A3)/(A1/ZMAS/100.)
WRITE(M,2)ETA
2 FORMAT(' J='F7.4/)
A1=A1/ZMAS/100.
A2=A2/ZMAS/100.
A3=1./ZMAS
WRITE(M,119)A1,A2,A3
119 FORMAT(' COEF. CINETIQUE'3F10.3/)
PROFI=-1.E30
CALL CVORM(TMIN,TMAX,EPS(4), CVPRH)
DO 11 I=1,NREA
R(I)=CVR1(GM(I),IM(I))+0.0005
11 RP(I)=CVR1(GPM(I),TPM(I))+0.0005
NR6=NREA*5
DO 10 I=1,NR6
10 AROND(I)=AROND(I)+0.0005
WRITE(M,20)

```



```

20  FORMAT(17X,'GIBB'//16X,'DATE'//16X,'EX'//16X,'RP')
    DO 21 I=1,NREA
21  WRITE(M,22)I,GM(I),TM(I),GPM(I),TPM(I),ZLBOM(I),R(I),RP(I)
22  FORMAT(1H0,11,7(1X,55,31)
    WRITE(M,23)(I,GM(I),TM(I),GPM(I),TPM(I))
23  FORMAT(1X,/' W/G '5(13='F9.3))
    WRITE(M,24)PROFI
24  FORMAT(//, ' PROFIT='F7.4)
    WRITE(M,31)
31  FORMAT(1H1)
    CALL EXIT
    END

```

DONNEES NUMERIQUES

1

2.504.501E-41E-41E-41E-41E-60.150000.031251.000007.8000010.800081.40000 128

SUBROUTINE CVORM(AA,BB,EPS,F)

A=AA

B=BB

UAT=0.2819660)1

P=A

Q=B

T=(Q-P)*UAT

A=P+T

B=Q-T

CALL F(A,R)

CALL F(B,S)

IF(ABS(B-A)/ABS(A)-EPS)6,2,3

IF(R-S)4,1,5

P=A

A=B

B=Q-(Q-P)*UAT

R=S

CALL F(B,S)

GOTO2

Q=B

P=A

A=P+(Q-P)*UAT

S=R

CALL F(A,R)

GOTO2

RETURN

END

FUNCTION CVY2(X)

COMMON(132),V(132),CACT1,A1,A2,A3,EPS15,DTG,XG,C1,C2,C3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS

T=X+DTG

R=CVR(X,T)

IF(R)10,10,11

CVY2=1.E+30

RETURN

CVY2=1./R

RETURN

END

FUNCTION CVH(G)

COMMON(132),V(132),CACT1,A1,A2,A3,EPS15,DTG,XG,C1,C2,C3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS

A=CVR1(G,G+DTG)

B=SQRT(A1-G)

C=A2-C.5*G

E=A3-C.5*G

ZK1=3.686*B*EXP(12.07)*C/E**1.5

ZK2=3.6E6*G*SQRT(C)/(E*B)*EXP(22.75)

F=1./11.+0.311*(G+DTG)

CVH=1A+(DTG*CACT1*((150.*ZK1)*EXP(-50.*F)+36.45*ZK2*EXP(-30.*F)))*
10.311*(F*F))/A*A

RETURN

END


```

SUBROUTINE CVPRH (TE,PROF)
EXTERNAL CVF2,CVR1
DIMENSION G(9),T(9),GP(9),TP(9)
COMMONU(132),V(132),CACTI,A1,A2,A3,EP5(4),DTG,XG,C1,C2,D3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS
G(NREA)=0.
T(NREA)=TE
J=NREA
IF(NREA-1)20,20,21
21 CALL CVMF(G(J),T(J),GP(J),TP(J))
CALL CVMEL(GP(J),TP(J),G(J-1),T(J-1),EP5(4))
J=J-1
IF(J-1)20,20,21
20 D3=DELTA
GO TO (2,1),KAS
1 TP(1)=T(1)+GPM(1)-G(1)
GP(1)=GPM(1)
GO TO 12
2 IF(CVR1(1),T(1))-DELTA)10,10,11
10 CALL CVSB(G(1),T(1),X1,X2,CVR1,EP5(5))
CALL CVOR(G(1),T(1),X1,X2,X3,X4,CVR1,EP5(1))
CALL CVSB(X3,X4,GP(1),TP(1),CVF2,EP5(3))
GO TO 12
11 CALL CVSB(G(1),T(1),GP(1),TP(1),CVF2,EP5(3))
12 CALL CVREA(G,GP,T,TP,PROF)
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE CVMF(GE,TE,GS,TS)
EXTERNAL CVR1,CVH
COMMONU(132),V(132),CACTI,A1,A2,A3,EP5(4),DTG,XG,C1,C2,D3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS
YG=GE
YT=TE
DTG=YT-TE
D3=GE/CVR1(GE,TE)
CALL CVSB(GE,TE,XG,XT,CVR1,EP5(5))
CALL CVOR(GE,TE,XG,XT,ZG,ZT,CVR1,EP5(1))
CALL CVCIT(GE,ZG,IMAX,CVH,EP5(2),C1,C1,N)
CALL CVF1 (ZG,A)
N1=SIGN(1.,A)
ZG1=(XG+ZG)/2.
7 CONTINUE
CALL CVF1 (ZG1,A)
N3=SIGN(1.,A)
IF(N3+N1)8,9,8
8 ZG=ZG1
X2=ZG1
C1=C1+C2
GO TO 17
9 XG=ZG1
X2=ZG1
17 ZG1=(XG+ZG)/2.
IF(ABS(X2-ZG1)/ABS(X2)-EP5(3))10,10,7
10 GS=ZG1
TS=TE+GS-GE
RETURN
END

```



```

SUBROUTINE CVF1 (G,A)
EXTERNAL CVH
COMMONU(132),V(132),CACT1,A1,A2,A3,EPS(5),DTG,XG,C1,C2,D3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS
CALL CVCIT(XG,G,15,CVM,EPS(2),C2,C2,N)
A=C1+C2+D3-G/CVR1(G,G+DTG)
RETURN
END

```

```

FUNCTION CVF2(G,T)
COMMONU(132),V(132),CACT1,A1,A2,A3,EPS(5),DTG,XG,C1,C2,D3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS
CVF2=CVR1(G,T)-D3
RETURN
END

```

```

FUNCTION CVR (G,T)
COMMONU(132),V(132),CACT1,A1,A2,A3,EPS(5),DTG,XG,C1,C2,D3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS
A=1+.311*T
IF (G-A1)123,123,124
124 CVR =-1.E+30
RETURN
123 B=SQRT(A1-G)
C=A2-0.5*G
D=A3-0.5*G
CVR=3.6E6*(EXP(12.07-90./A)*B*C/D**1.5-EXP(12.75-86.45/A)*G*SQRT(C
1)/(D*B))*CACT1
RETURN
END

```

```

FUNCTION CVR1(G,T)
COMMONU(132),V(132),CACT1,A1,A2,A3,EPS(5),DTG,XG,C1,C2,D3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS
A=1+.311*T
IF (G-A1)123,123,124
124 CVR1=-1.E+30
RETURN
123 B=SQRT(A1-G)
C=A2-0.5*G
D=A3-0.5*G
CVR1=3.6E6*(EXP(12.07-90./A)*B*C/D**1.5-EXP(12.75-86.45/A)*G*SQRT(
1C)/(D*B))*CACT1
RETURN
END

```



```

SUBROUTINE CVREA(G,GP,T,TP,PROF)
EXTERNAL CVY2
DIMENSION G(9),GP(9),T(9),TP(9),ZLBDA(9),EO(9)
COMMON(192),V(192),CACTI,A1,A2,A3,EPS(5),DTG,XG,C1,C2,B3,ZMU,DELT
1A,GM(9),TM(9),GPM(9),TPM(9),ZLBDM(9),W(9),NREA,IMAX,PROFI,KAS
N=NREA-1
PROF=GP(1)
ZLBDA(1)=1.0
IF(N)12,12,13
13 DO 20 I=2,NREA
20 ZLBDA(I)=(ZLBDA(I-1)*T(I-1))/TP(I)
12 DO 11 I=1,NREA
IF(T(I))100,100,101
101 IF(GP(I))100,100,11
11 CONTINUE
IF(N)8,8,7
7 DO 6 I=1,N
IF(ZLBDA(I)-ZLBDA(I+1))100,100,6
6 CONTINUE
8 DO 10 I=1,NREA
DTG=T(I)-G(I)
CALL CVCIT(G(I),GP(I),IMAX,CVY2,PS(1),EOS(1),EOS(N),N)
EO(I)=EOSIN*ZLBDA(I)
10 PROF=PROF-DELTA*EO(I)
PROF=PROF-ZMU*ZLBDA(NREA)*T(NREA)
IF(PROF-PROFI)457,50,50
50 PROFI=PROF
DO 52 I=1,NREA
GM(I)=G(I)
GPM(I)=GP(I)
TM(I)=T(I)
TPM(I)=TP(I)
ZLBDM(I)=ZLBDA(I)
52 W(I)=EO(I)
457 RETURN
100 PROF=-1.E30
RETURN
END

```



```

SUBROUTINE CVOR (G,T,X,Y,GP,TP,CVR,EPSC)
OR=0.3819556011
C=X
D=Y
A=G
B=T
D1=D
1  Q=B+(D-B)*OR
  V=A+Q-B
  F1=CVR(V,Q)
6  U=D-(D-B)*OR
  W=A+U-B
  F2=CVR(W,U)
5  IF(ABS(U-Q)/ABS(U)-EPSC)7,7,8
7  TP=(U+Q)/2.
22 GP=A+TP-B
  RETURN
8  IF(F1-F2)9,11,10
11 B=Q
  D=U
  A=V
  C=W
  GO TO 1
9  B=Q
  A=V
  Q=U
  V=W
  U=D-(D-B)*OR
  W=A+U-B
  F1=F2
  F2=CVR(W,U)
  GO TO 5
10 D=U
  C=W
  U=Q
  W=V
  Q=B+(D-B)*OR
  V=A+Q-B
  F2=F1
  F1=CVR(V,Q)
  GO TO 5
END

```



```

SUBROUTINE CVSB(GE,TE,GS,TS,F,EPS)
INTEGER S1,S2,S3
PAS=1.
A=GE
B=TE
F1=F(A,B)
S1=SIGN(1.,F1)
DO 10 I=1,10
D=B+PAS
PAS=2.*PAS
C=A+D-B
F2=F(C,D)
S2=SIGN(1.,F2)
IF(S1+S2)10,20,10
10 CONTINUE
GS=0.
TS=0.
RETURN
20 H=(B+D)*0.5
E=A+H-B
IF(ABS(H-B)/ABS(H)-EPS)30,30,40
40 F3=F(E,H)
S3=SIGN(1.,F3)
IF(S1+S3)50,60,50
50 A=E
B=H
GO TO 20
60 C=E
D=H
GO TO 20
30 GS=A
TS=B
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE CVMEL(GP,TP,G,T,EPS)
P=GP/TP
A=0.
B=TP
RE=CVR1(GP,TP)
10 T=0.5*(A+B)
G=GP+(T-TP)*P
RS=CVR1(G,T)
IF(ABS(B-A)/ABS(B)-EPS)5,5,6
6 IF(RS-RE)3,5,4
3 A=T
GO TO 10
4 B=T
GO TO 10
5 RETURN
END

```



```

SUBROUTINE CVCOF
  DIMENSION TETA(132)
  COMMON A(132),CTETA(132)
  N=4
  L=1
  K=1
14  M=N/2+1
  DO 10 I=1,M
    TETA(L)=(2.*(1-L+1.))/(2.*N+2.*3.)+19926
    CTETA(L)=COS(TETA(L))
10  L=L+1
  DO 12 K1=1,M
    A(K)=1.
    K1=K1+1
  DO 15 J=2,M1,2
    A(K)=A(K)-2./(J*J-1)*COS(J*TETA(K))
12  K=K+1
  N=N*2
  IF(N-128)14,14,13
13  RETURN
  END

```

```

SUBROUTINE CVCIT(A,B,IMAX,F,DEL,S1,CVIN,N)
  COMMONAL(132),CTETA(132)
105  N=4
  D=(B-A)/2.
  C=(B+A)/2.
  PI=3.1415925
  L=1
16  M=N+1
  NS2=N/2
  S=0.0
  DO 10 I=1,NS2
    S=S+AL(L)*F(C-D*CTETA(L))+F(C-D*CTETA(L))
10  L=L+1
    S=S+AL(L)*F(C)
    L=L+1
  CVIN=S*(B-A)/M
  IF(N=*)12,13,12
12  IF(ABS(ABS(CVIN)-ABS(S1))/ABS(CVIN)-DEL)14,14,13
14  RETURN
13  N=N*2
  S1=CVIN
  IF(N=IMAX)16,16,15
15  RETURN
  END

```


NOM DE L'ETUDIANT : VINCENT Louis

Nature de la thèse : DOCTEUR INGENIEUR

Vu, Approuvé

et Permis d'imprimer

NANCY, le 21 Décembre 1970

Le Doyen,



J. AUBRY



